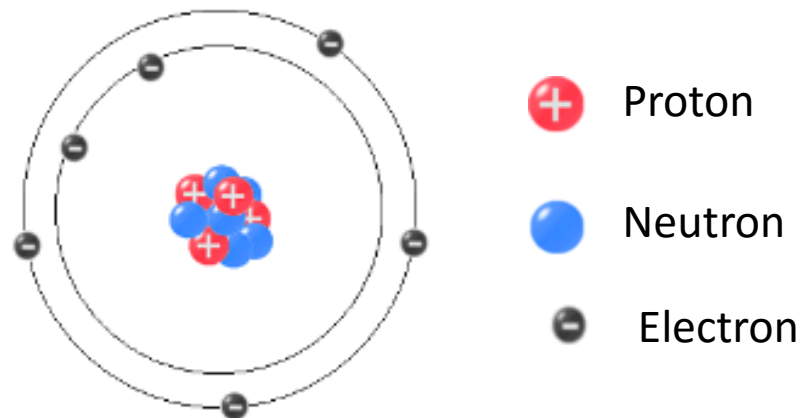


# Constituants de la matière

L'ensemble de la matière de l'univers, vivante ou inerte, est constitué de particules appelées atomes.

L'atome comprend : un noyau et des électrons en mouvement rapide autour de ce noyau. Cette représentation ressemble aux planètes du système solaire en mouvement autour du Soleil.



# Atomistique

## Chimie générale et précisément la chimie descriptive

### Définition:

- Etude de la composition de l'atome ainsi que de leurs propriétés.
- Etude de la structure interne de l'atome et des échanges d'énergies en son sein.
- Etude de la répartition des électrons autour du noyau et les conséquences de cette répartition sur les propriétés physico-chimiques des éléments.

# Cours d'atomistique

**Chapitre 1 : Constituants de l'atome**

**Chapitre 2 : Noyau atomique et radioactivité**

**Chapitre 3 : Structure électronique des atomes**

**Chapitre 4 : Classification périodique des éléments**

**Chapitre 5 : Liaisons chimiques et géométrie des molécules**

# *Constituants de l'atome*

*Un peu d'histoire sur la  
découverte de l'atome et ses  
constituants !*

# Démocrite (460 av. J.-C. 370 av. J.-C.)

## *Découverte des atomes = atomos*



### Citation de Démocrite :

*"Si tout corps est divisible à l'infini, de deux choses l'une : ou il ne restera rien ou il restera quelque chose. Dans le premier cas la matière n'aurait qu'une existence virtuelle, dans le second cas on se pose la question : que reste-t-il ? La réponse la plus logique, c'est l'existence d'éléments réels, indivisibles et insécables appelés donc atomes".*

**La matière ne peut pas être divisée infiniment. Les plus petites choses que l'on obtient sont des entités insécables: les « atomos idea »**

# Démocrite (460 av. J.-C. 370 av. J.-C.)

## *Découverte des atomes = atomos*



Démocrite pensait que la matière était constituée d'atomes, de petites particules indivisibles, infiniment petites et séparées par du vide. C'est la théorie atomiste.

D'après le modèle de Démocrite, les atomes sont tous identiques. Ce qui distingue une substance d'une autre est l'arrangement des atomes.

**Mais Démocrite n'a aucune preuve expérimentale et sa démarche n'est que philosophique.**

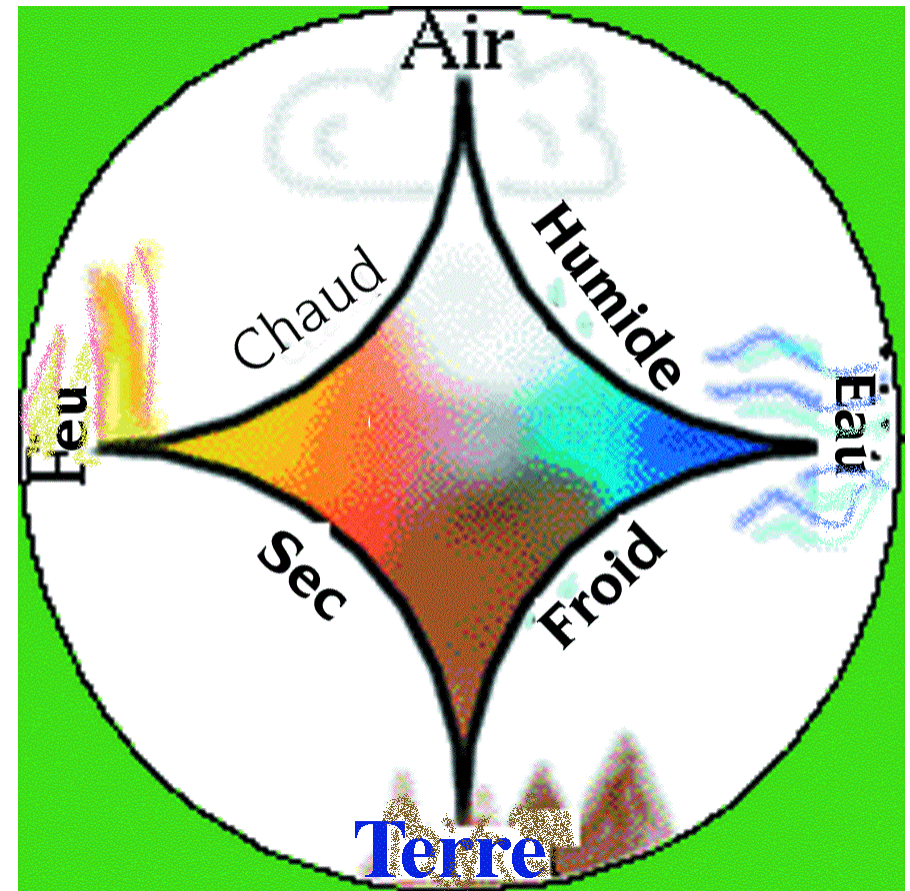


# Aristote 384 - 322 av. J-C.

Les grec ont dit... La matière est continue, pas de vide, pas d'atomes

La matière est formée  
de 4 éléments:

L'air  
La terre  
Le feu  
L'eau





# Antoine Lavoisier (1743-1794)

La chimie devient une science

1790 : La théorie des éléments chimiques

Il montre que la masse se conserve au cours d'une réaction chimique en accord avec la théorie atomiste.

Développe une théorie des éléments chimiques.



*Loi de la conservation de la matière*

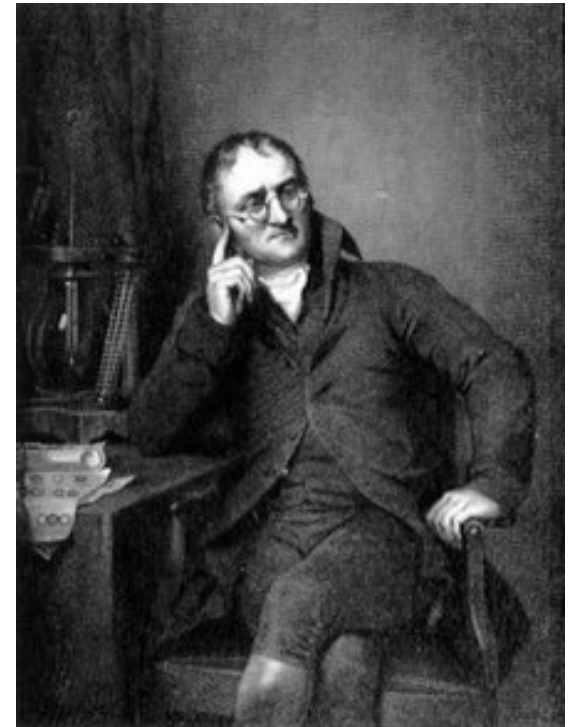
*" Rien ne se perd, rien ne se crée tout se transforme "*

# John Dalton (1766-1844)

## *Découverte des molécules*

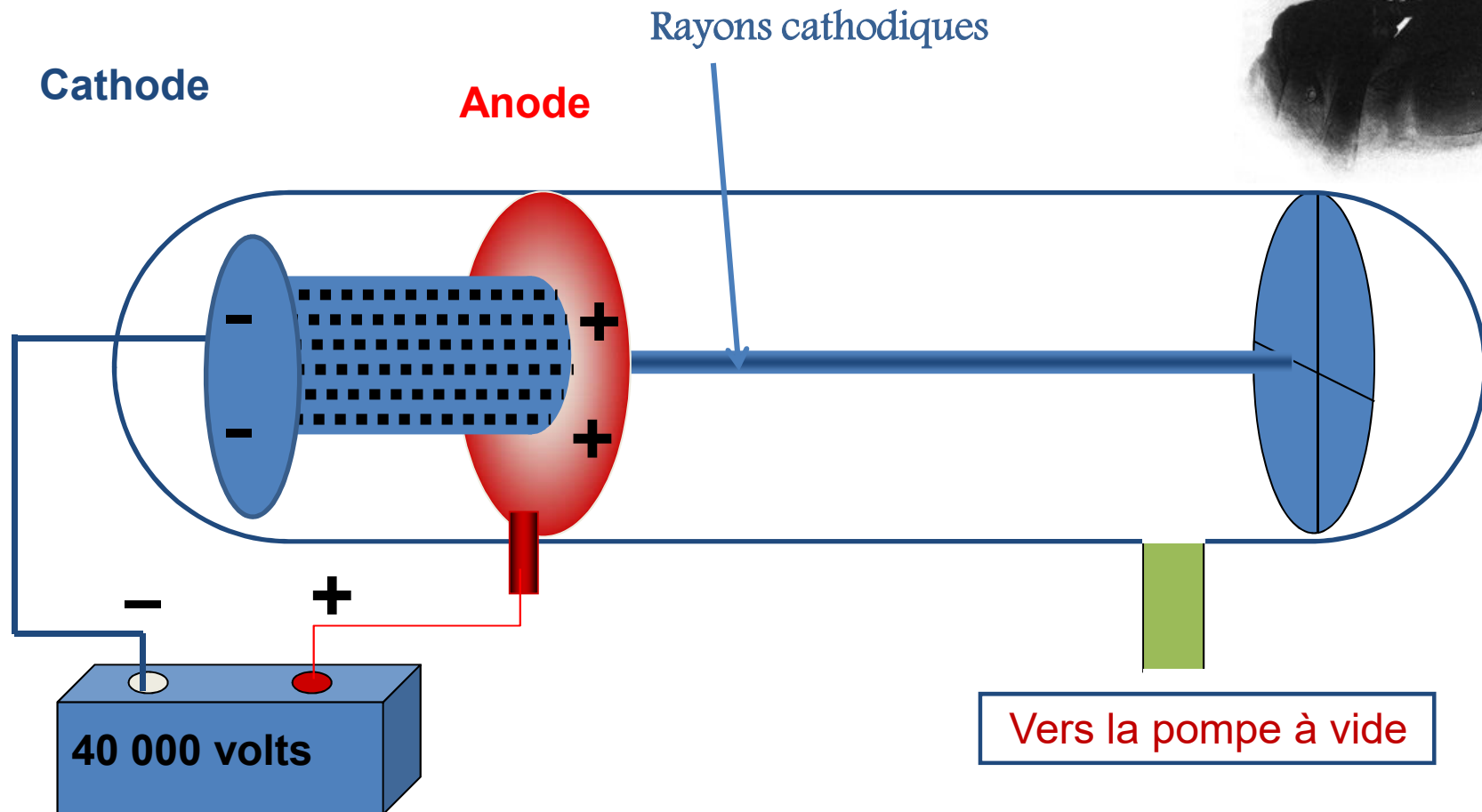
Ressort la théorie de Démocrite de l'oubli : Il a confirmé la théorie de Démocrite

- 1- La matière est composée d'atomes sous forme de sphère pleine, indivisible et indestructible.
- 2- Les atomes d'un même éléments sont identiques
- 3- Les atomes d'éléments différents ont des masses et des tailles différentes
- 4- Il est impossible de transformer les atomes d'un élément en ceux d'un autre élément.
- 5- Un composé est une combinaison spécifique d'atomes d'éléments d'espèce différente.
- 6- Dans une réaction chimique, les atomes changent de partenaires pour produire des corps nouveaux.



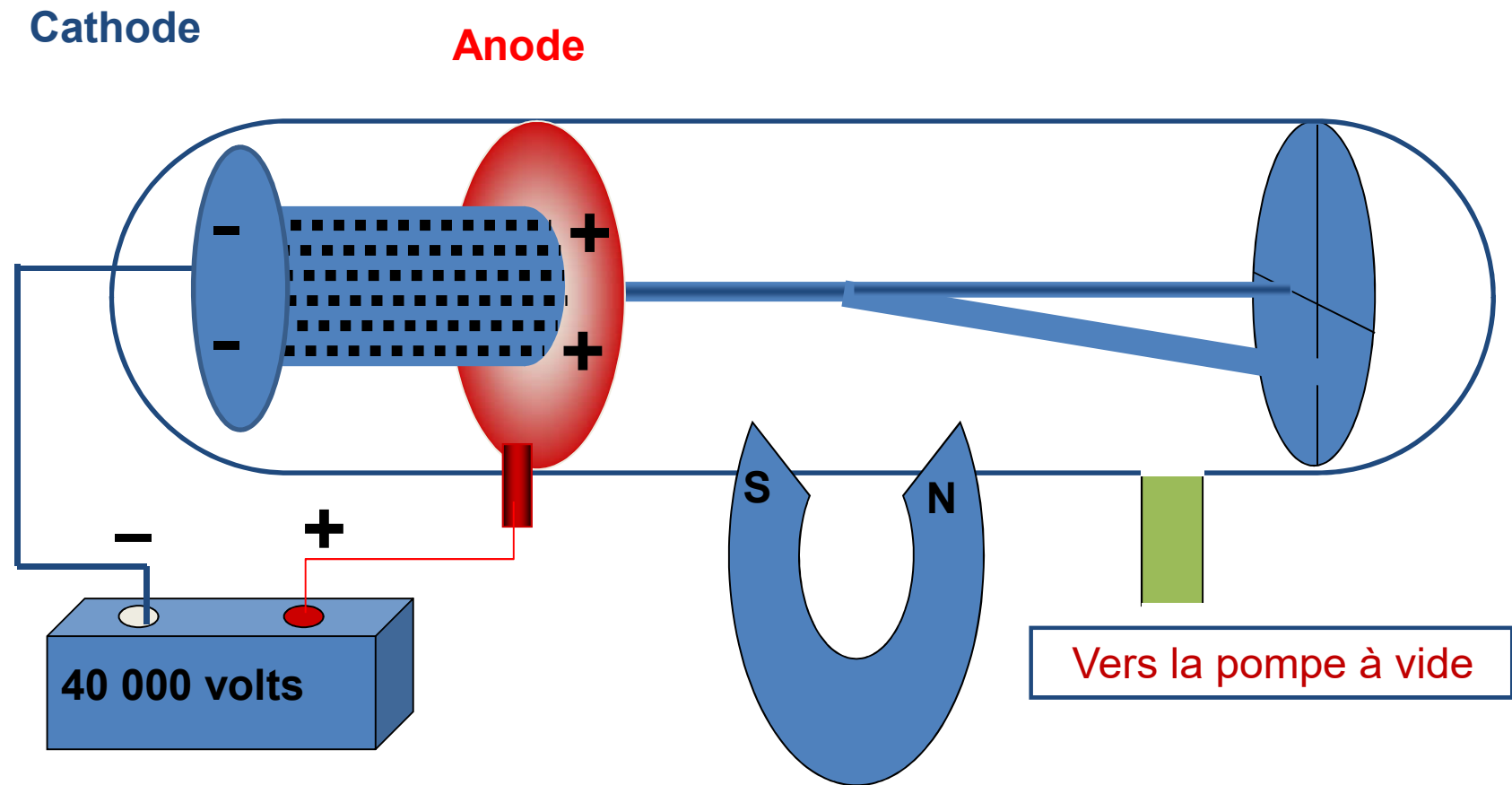
# Joseph John Thomson (1856-1940)

## *Découverte des électrons*

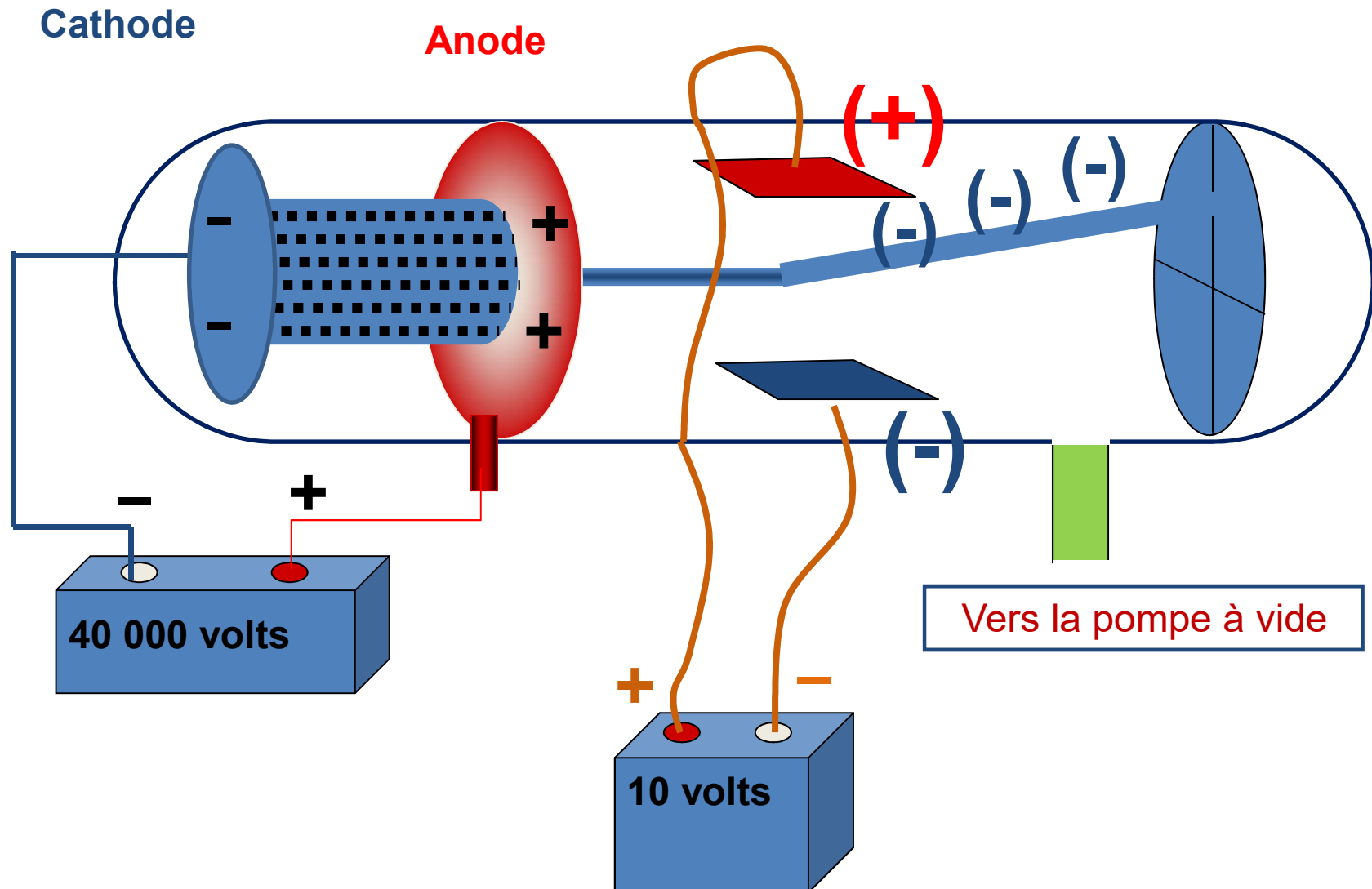


- Les faisceaux de charges électriques, qui voyagent de la cathode à l'anode, sont appelés **rayons cathodiques**.
- La trajectoire des rayons est rectiligne, et est perpendiculaire à la surface de la cathode.

# *Découverte des électrons*



# *Découverte des électrons*



# Joseph John Thomson (1856-1940)

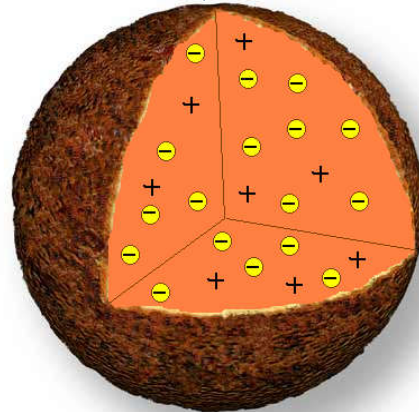
## *Découverte des électrons*



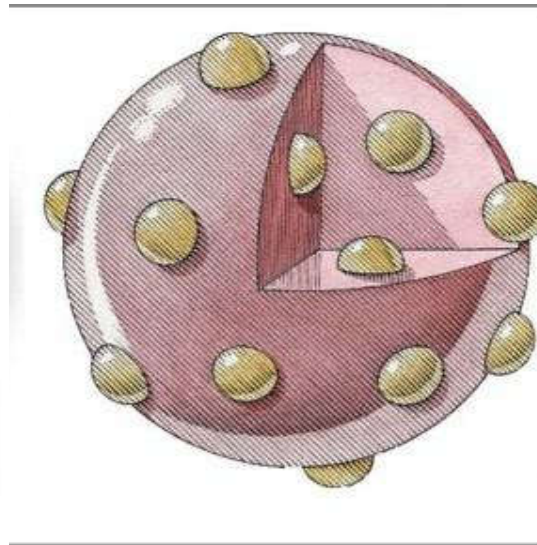
- Les rayons cathodiques sont déviés par un champ magnétique (un aimant) ou électrique
- 1887 : J. J. Thomson établit que les rayons cathodiques émis lorsque l'on soumet un gaz sous basse pression à une forte différence de potentiel sont constitués de particules chargées négativement arrachées à la matière, et découvre ainsi l'électron ; c'est la première décomposition de l'atome.

# Joseph John Thomson (1856-1940):

## *Découverte des électrons*



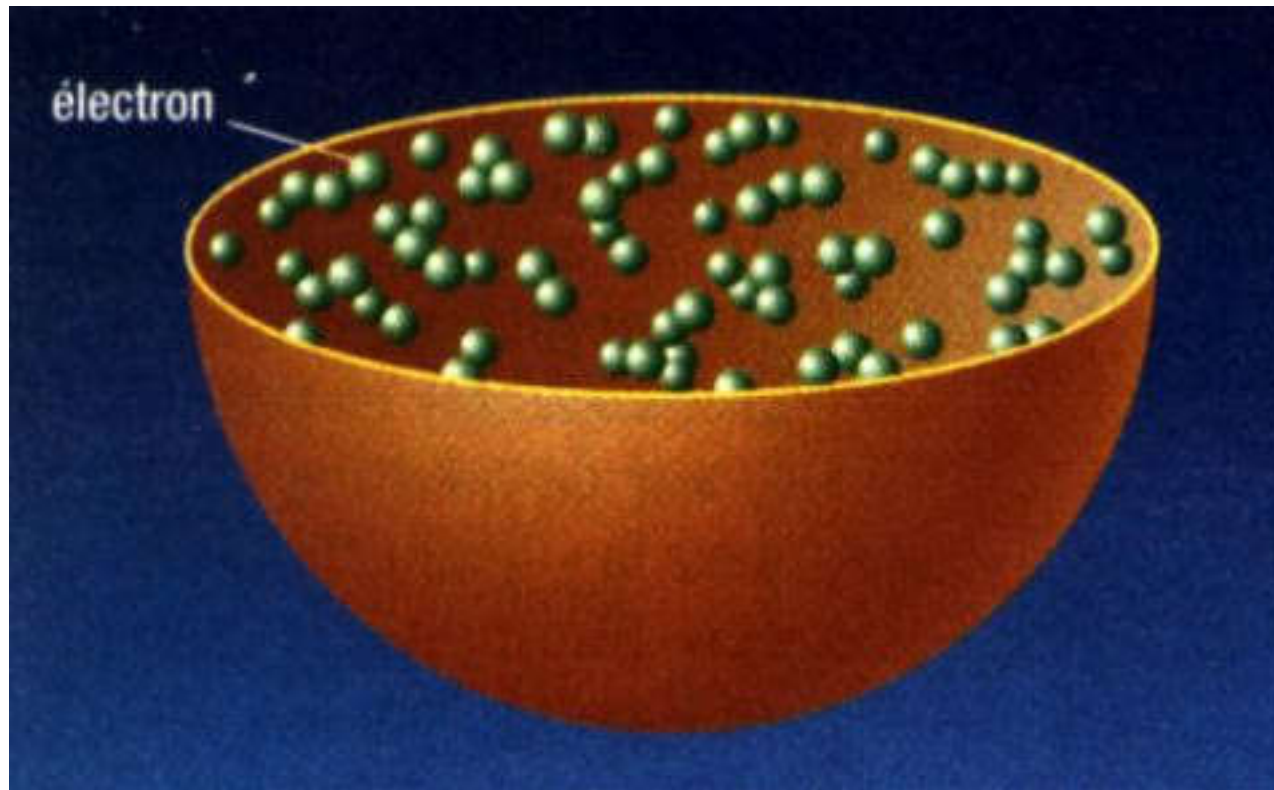
© 2006 Welach & Partner, Tübingen  
scientific multimedia



**Schématisation du plum-pudding**

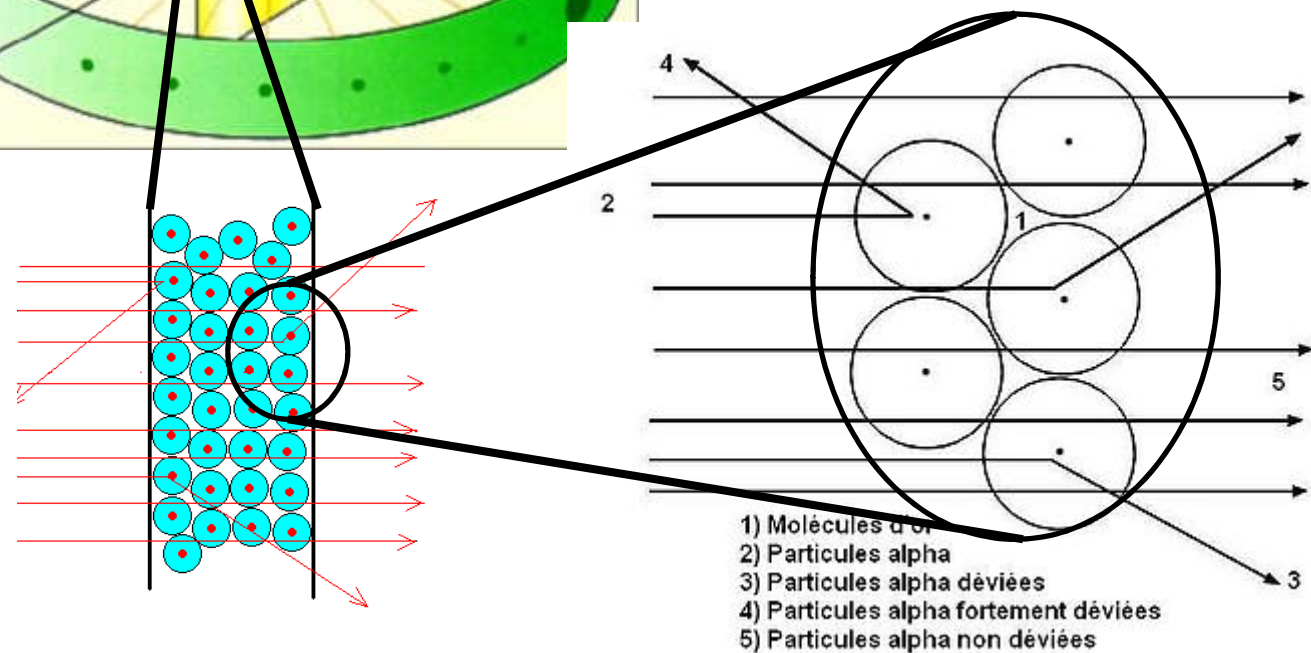
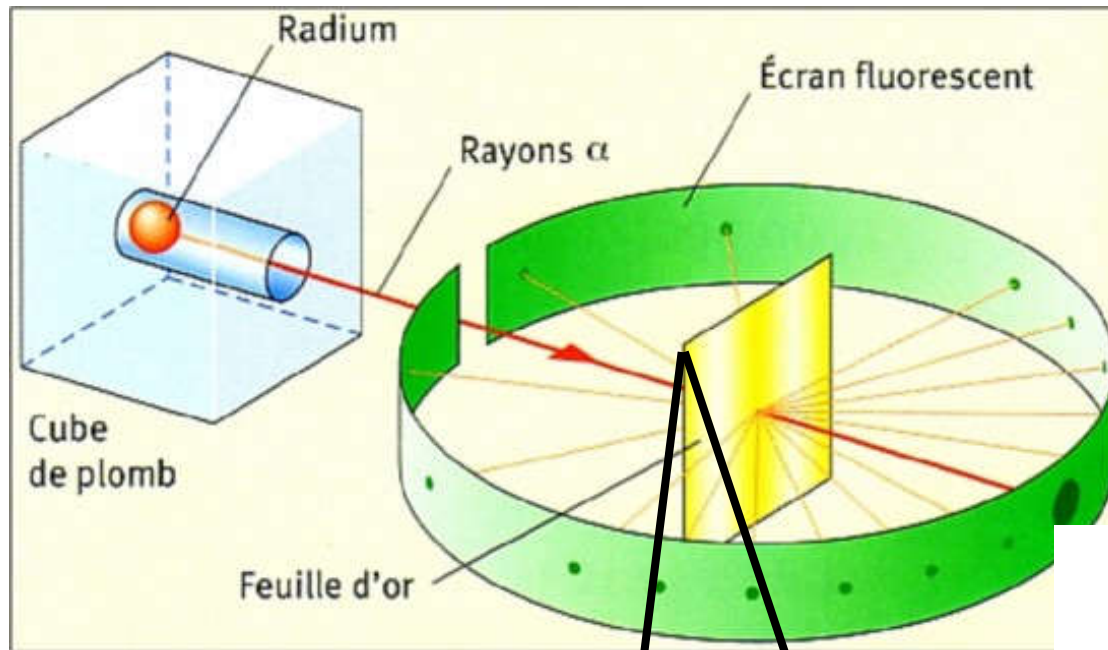


# L'atome selon Thomson



# Ernest Rutherford (1871-1937)

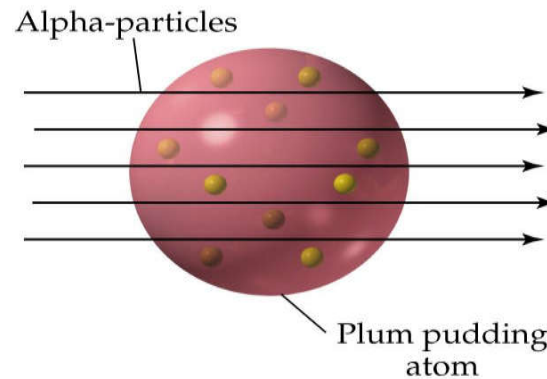
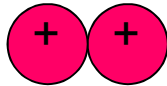
## *1913: Découverte des protons*



# *Comment doivent se comporter les particules alpha selon le modèle de Thomson*

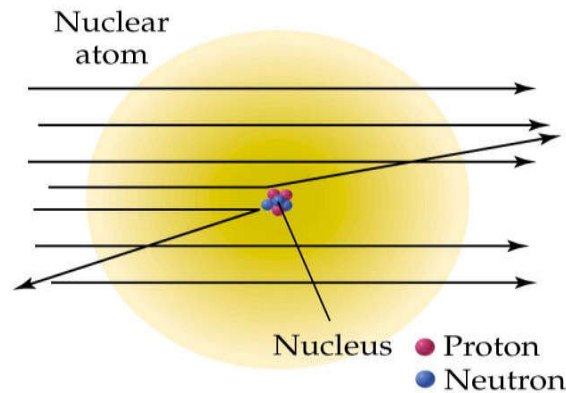
Particule alpha :

Deux protons liés ensemble (noyau d'hélium)



(a) Rutherford's Expected Result

**Résultat auquel s'attendait Rutherford selon le modèle de Thomson**



(b) Rutherford's Actual Result

# *Résultats de l'expérience*

## *Observations*

- la quasi totalité des particules  $\alpha$  ne sont pas déviées;
- un petit nombre de particule  $\alpha$  sont déviées avec de grands angles.

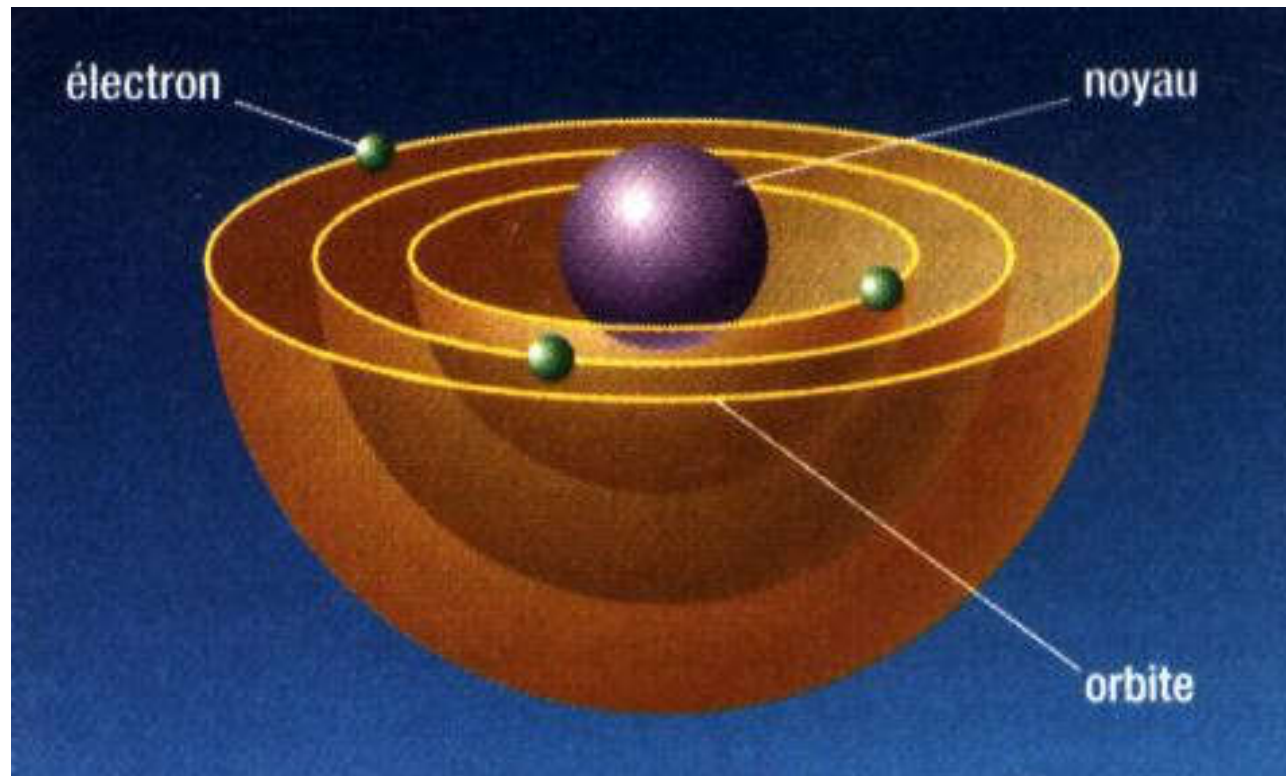
## *Conclusion*

- La charge n'est pas répartie uniformément!

# Le modèle de Rutherford

- L'atome est composé en majeure partie de vide
- La masse de l'atome est concentrée dans le noyau
- Les particules de charge positive sont appelées protons et composent le noyau
- Les électrons de masse négligeable et orbitent autour du noyau un peu comme des planètes autour du soleil
- Leur charge électrique est égale à celle des protons, mais de signe contraire (négatif), ce qui fait que l'atome est globalement neutre

# L'atome selon Rutherford



**Modèle lacunaire**

## ***Les protons et les neutrons***

- ✓ Les expériences qui ont mené à la conception nucléaire de l'atome ont également permis de déterminer le nombre de charges positives d'un noyau.
- ✓ Rutherford pensait que ces charges étaient portées par des particules appelées **protons** et que la charge d'un proton était l'unité fondamentale de charge positive; il avait raison.
- ✓ Par la suite, le nombre de protons de chaque atome a permis de clarifier la notion de numéro atomique.
- ✓ On s'est également rendu compte que si tous les protons ont la même masse, le nombre de protons n'est pas suffisant pour expliquer la masse d'un atome.
- ✓ On a donc fait l'hypothèse que le noyau atomique contient également des particules de masse semblable au proton, mais qui ne portent pas de charge électrique, les **neutrons**.



# James Chadwick (1891-1974)

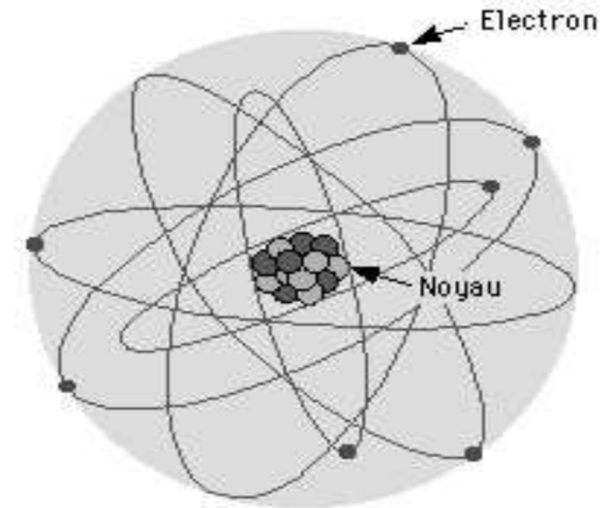
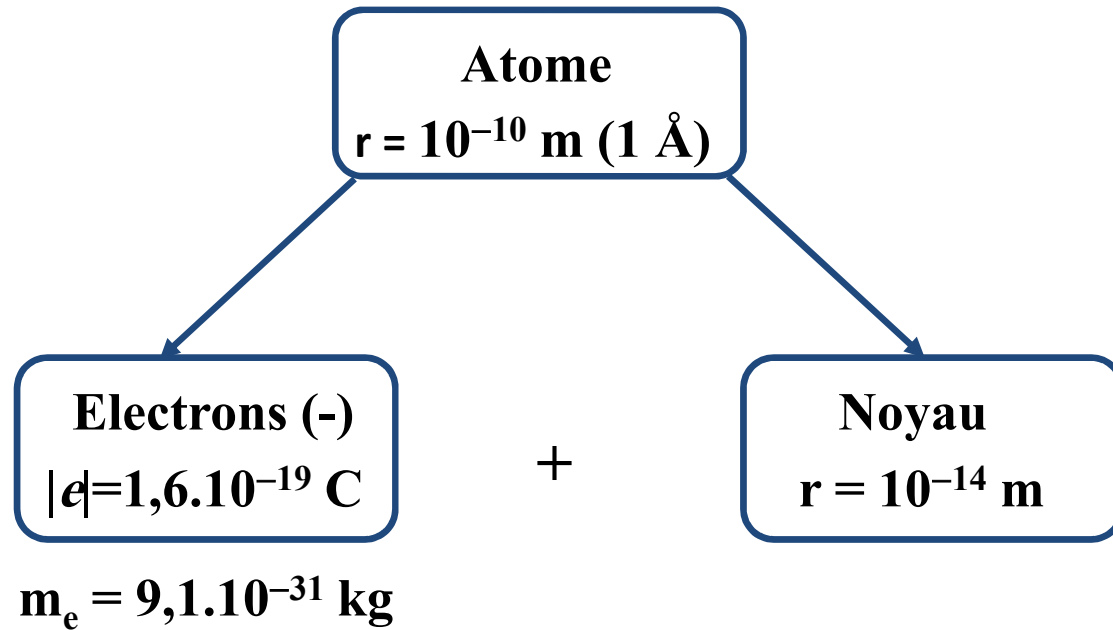
## *Découverte des neutrons*

- ✓ En 1930 , Bothe et Becker bombardent du Béryllium avec des particules  $\alpha$ .
- ✓ Un rayonnement est émis.
- ✓ Le physicien anglais Chadwick en 1932 démontre que ce rayon est constitué de particules neutres
- ✓ Ce sont les neutrons qui empêchent l'éclatement du noyau et qui le conservent stable!

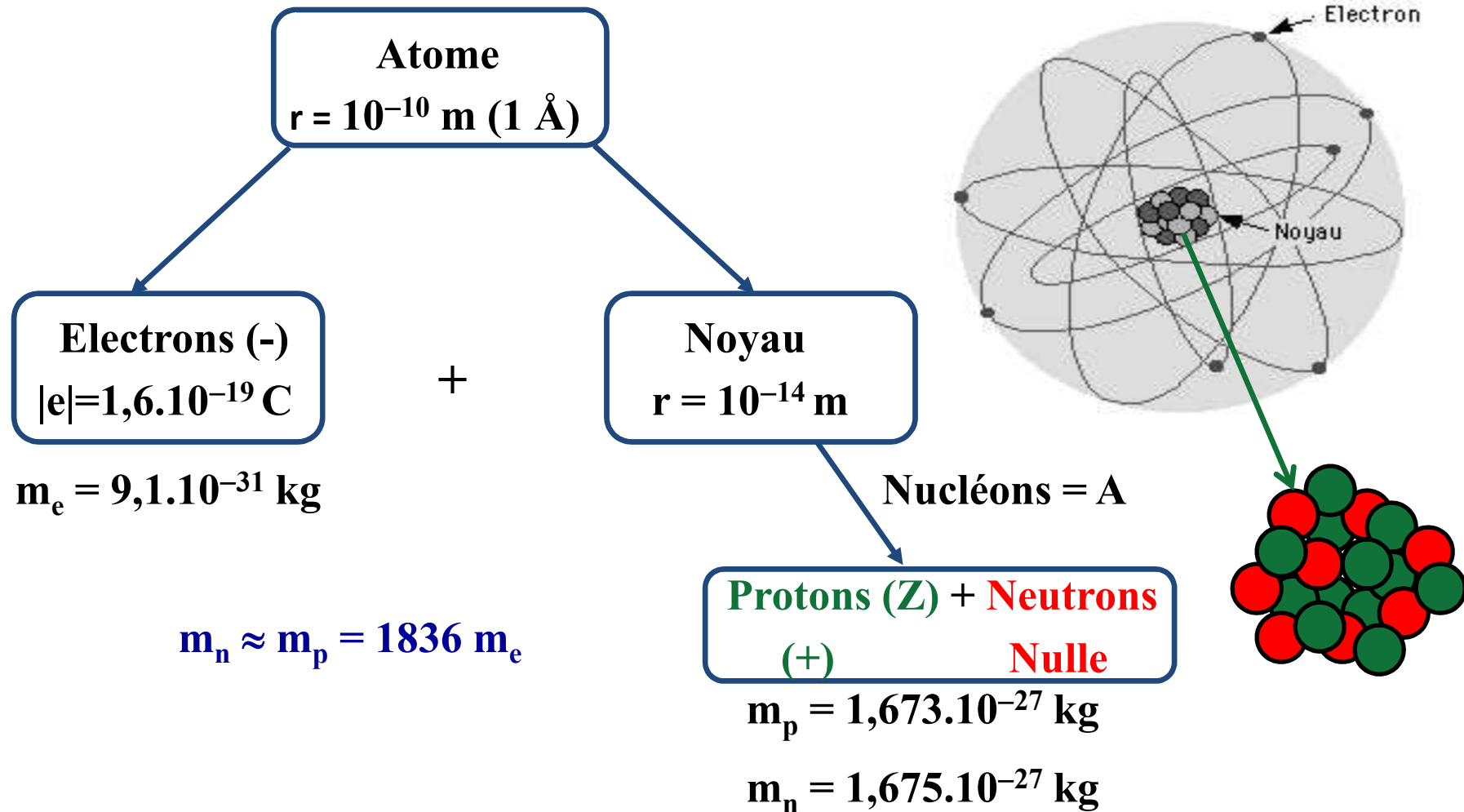


# *Caractéristiques de l'atome*

## Caractéristiques de l'atome



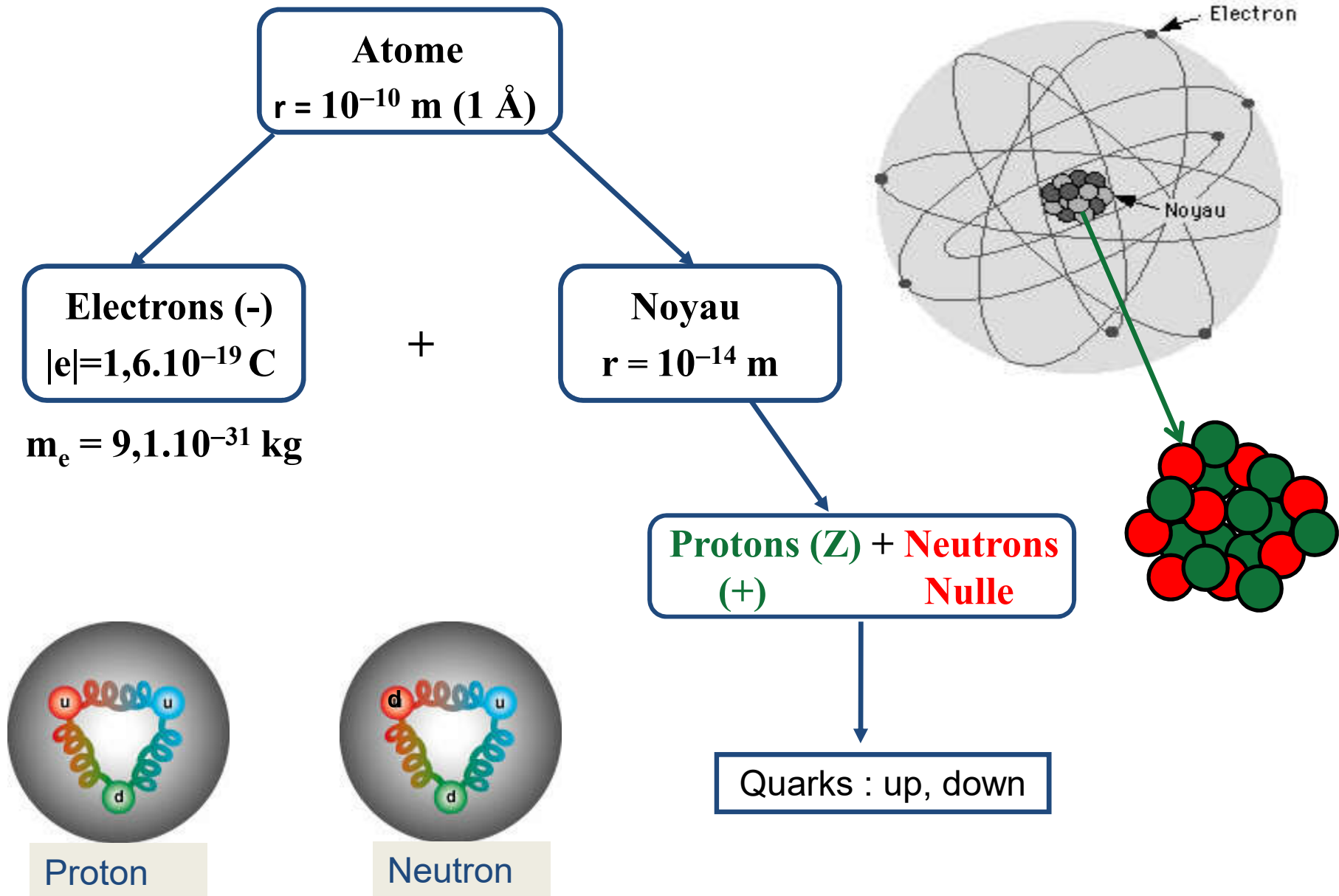
# Caractéristiques de l'atome



Charge de l'atome = Charge des électrons + charge des protons

$$0 = -Z + Z$$

# Caractéristiques de l'atome



### Caractéristiques des nucléons et des électrons

Particule	Charge (C)	Masse (uma <sup>(1)</sup> )	Masse (MeV <sup>(2)</sup> )
Proton	$1,602 \times 10^{-19}$	1,00759	938,21
Neutron	0	1,00898	939,51
Électron	$-1,602 \times 10^{-19}$	0,000548	0,511

(1) 1 uma = 1 unité de masse atomique =  $1,66 \times 10^{-27}$  kg

(2) 1 MeV =  $1,77 \times 10^{-30}$  kg (équivalence masse-énergie calculée avec  $E = mc^2$ )

$$1\text{MeV} = 10^6\text{eV} = 1,602.10^{-13}\text{J}$$

## Caractéristiques de l'atome

### ► Notation d'un atome

Un élément chimique (X) est complètement défini par Z, le numéro atomique



Ions  $q \neq 0$ . Nb électrons  $E = Z - q$

### ► Nombre de charge ou numéro atomique = Z (proton)

 Nombre d'électron pour un atome neutre

### ► Nombre de masse = A (nucléon)

$$A = Z + N$$

Ces deux nombres permettent de connaître complètement la composition du noyau



## Exemple d'application 1 :

Calculer le nombre de protons et de neutrons des atomes suivants :

➤ Le carbone :  $^{12}_6\text{C}$ .

➤ Le fer :  $^{56}_{26}\text{Fe}$ .

➤ L'hydrogène :  $^1_1\text{H}$

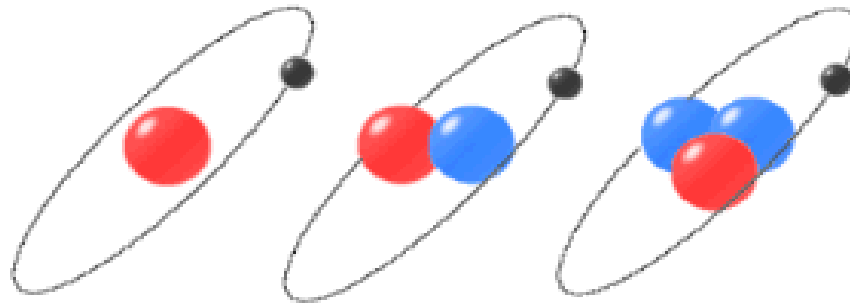
➤ Zirconium :  $^{91}_{40}\text{Zr}$

➤ Cobalt :  $^{39}_{20}\text{Co}$

## Caractéristiques de l'atome

### ➤ Isotopes :

Les isotopes sont les atomes d'un même élément chimique X dont les noyaux renferment le même nombre de protons (même numéro atomique) mais des nombres de neutrons différents (nombres de masse différents).



\* **Exemples isotopes naturels** : on peut citer l'Hydrogène (1 proton) et le Deutérium (1 proton/1neutron ; atome présent dans l'eau lourde) ou encore le Tritium (1 proton/2 neutrons).

${}^1_1\text{H}$  (Hydrogène),  ${}^2_1\text{H}$  (Deutérium) et  ${}^3_1\text{H}$  (Tritium) sont les isotopes de l'hydrogène

\* **Exemples isotopes artificiels** : ces isotopes sont obtenus en bombardant des noyaux d'atomes stables avec des particules appropriées. C'est par exemple le cas de l'Iode 123 (radioactif) obtenu à partir de l'Iode 127 (stable). En général, la plupart des isotopes artificiels sont radioactifs.

## Caractéristiques de l'atome

### ➤ Isotopes

Ex :

$^{131}_{53}\text{I}$  (78 neutrons) = radioactif

$^{123}_{53}\text{I}$  (70 neutrons) = radioactif

$^{127}_{53}\text{I}$  (74 neutrons) = stable

➤ **Isobares** = atomes de nombres de masse identiques

➤ **Isotones** = atomes de nombres de neutrons identiques

## Caractéristiques de l'atome

**Exemple : Le carbone comporte trois isotopes naturels**

Elément chimique	Isotopes	Nbre de masse	Numéro atomique (Z)	Nbre de neutrons
$\begin{smallmatrix} A \\ Z \end{smallmatrix} \text{C}$	$^{12}_6\text{C}$	12	6	6
	$^{13}_6\text{C}$	13	6	7
	$^{14}_6\text{C}$	14	6	8

### ➤ Masse atomique :

La masse atomique d'un élément chimique est la moyenne des masses atomiques de ses isotopes multipliées par leur abondance relatives  $x_i$  (ou pourcentage).

$$M_{\text{at}} = \sum_i m_i \frac{x_i}{100} = m_1 \frac{x_1}{100} + m_2 \frac{x_2}{100} + \dots$$

## Exemple d'application 1 :

Cl (naturel) =  $^{35}_{17}\text{Cl}$  (75,4%) +  $^{37}_{17}\text{Cl}$  (24,6%) et  $m(^{35}_{17}\text{Cl}) = 34,97\text{g/mol}$ ,  $m(^{37}_{17}\text{Cl}) = 36,97\text{g/mol}$

$$M_{\text{Cl}} = 34,97 \times \frac{75,4}{100} + 36,97 \times \frac{24,6}{100} = 35,46 \text{ g/mol}$$

## Test :

Le cuivre naturel est composé de deux isotopes stables de masses atomiques respectives 62,929 et 64,927. Le numéro atomique du cuivre est  $Z=29$ .

Indiquer la composition des deux isotopes.

1. Un des isotopes possède 29 neutrons et 34 protons, l'autre isotope possède 29 protons et 34 neutrons
2. Un des isotopes possède 29 protons et 34 neutrons, l'autre isotope possède 29 protons et 36 neutrons
3. Un des isotopes possède 30 protons et 33 neutrons, l'autre isotope possède 29 protons et 36 neutrons
4. Un des isotopes possède 29 protons et 35 neutrons, l'autre isotope possède 29 protons et 37 neutrons

# *Structure électronique des atomes*

# Atomistique

**Chimie générale et précisément la chimie descriptive**

## **Objectifs:**

- Etude de la composition de l'atome ainsi que de leurs propriétés.
- Etude de la structure interne de l'atome et des échanges d'énergies en son sein.
- Etude de la répartition des électrons autour du noyau et les conséquences de cette répartition sur les propriétés physico-chimiques des éléments.



# *Modèles de la structure des atomes*

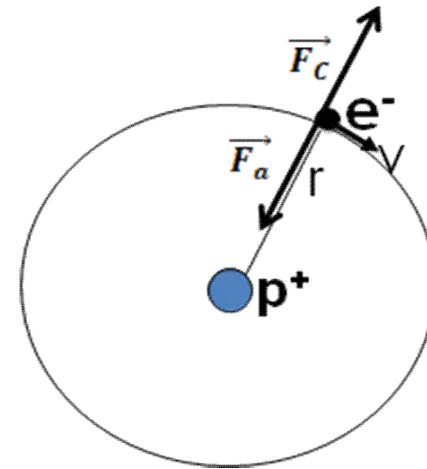
*Modèle classique*

## *Quelle théorie choisir pour étudier un atome ?*

Jusqu'au la fin du 19<sup>ème</sup>, on utilisait la mécanique classique, théorie ancienne très solide pouvant prévoir le mouvement des systèmes en fonction des forces qu'on leur fait subir. **Modèle de Rutherford**

Noyau dans lequel est concentrée toute la masse de l'atome et autour duquel gravitent des électrons

La stabilité mécanique du à compensation des  $F_a$  par les  $F_c$  dues à la rotation des électrons autour du noyau



L'avantage de ce modèle c'est qu'il ne fait appel qu'aux lois de la mécanique classique

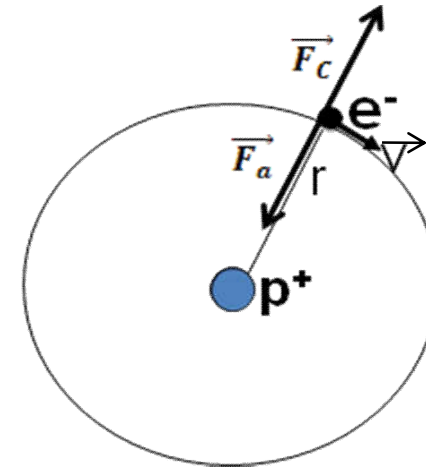
## 1) Le système est stable par les deux forces: centrifuge/attraction

$$|\vec{F_c}| = \frac{mv^2}{r} \quad |\vec{F_a}| = \frac{e^2}{4\pi\epsilon r^2}$$

Le système est en équilibre si :  $|\vec{F_c}| = |\vec{F_a}|$

c.à.d:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon r^2} \quad (1)$$



## 2) Conservation de l'énergie : E = Ecinétique + Epotentielle

$$E_p = \int F_a \cdot dr = \int \frac{e^2}{4\pi\epsilon r^2} dr = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon r}$$

due à l'attraction du noyau

D'autres part :

$$E_c = \frac{1}{2} mV^2 = \frac{e^2}{8\pi\epsilon r}$$

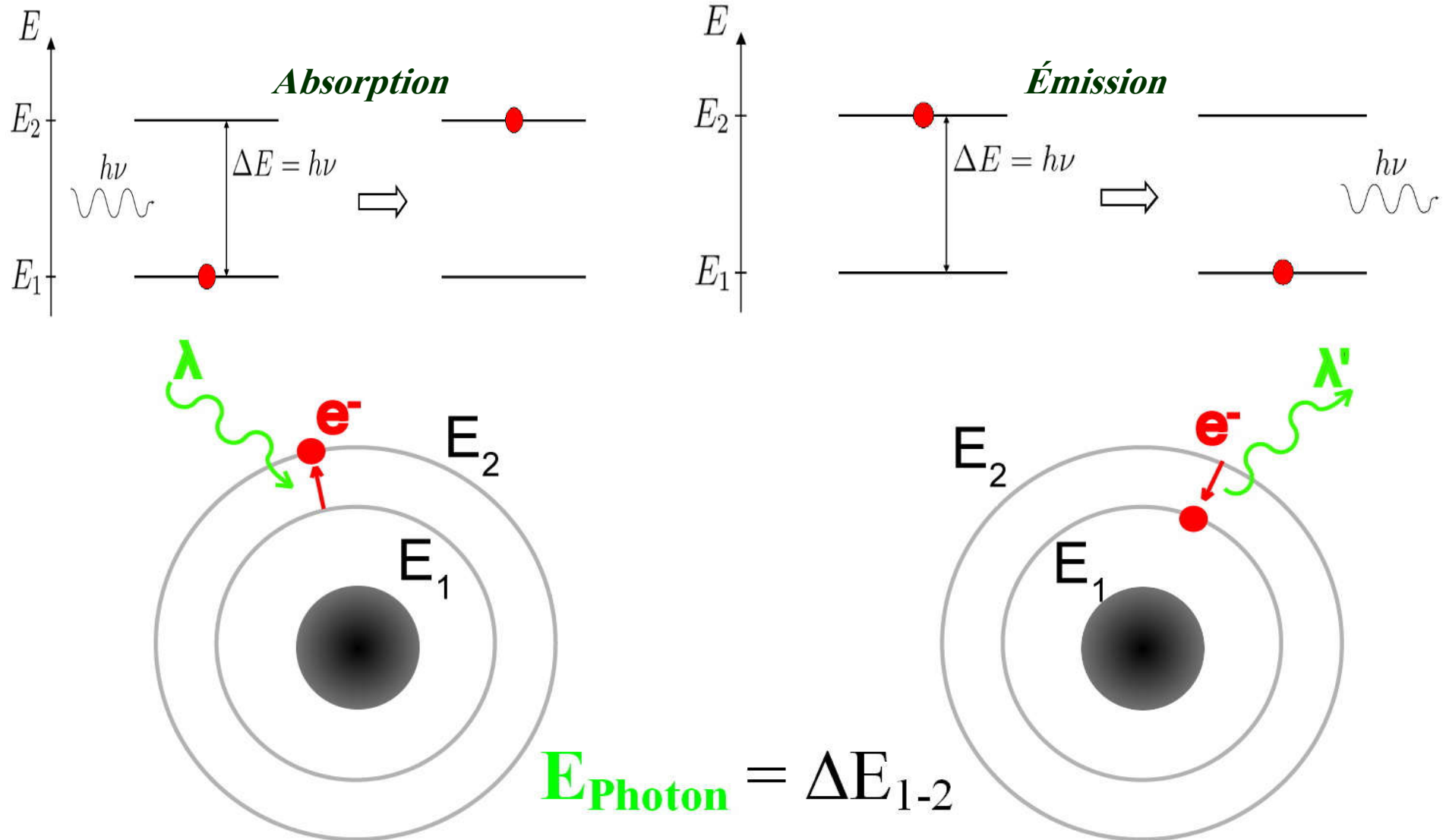
Donc :  $E = E_p + E_c$  On a:

$$E = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon r} \quad (2)$$

E dépend de r  
Ça correspond  
pas à la réalité  
expérimentale

# ***Échec du modèle de Rutherford***

## Absorption et émission



## ***Insuffisance du modèle de Rutherford***

Le modèle de Rutherford souffrait de sérieuses faiblesses que la physique classique ne parvenait pas à corriger.

**La théorie électromagnétique exige que l'électron rayonne des ondes électromagnétiques, donc il va perdre de l'énergie et finirait par tomber sur le noyau**

**Energie lumineuse émise varie de façon continue**



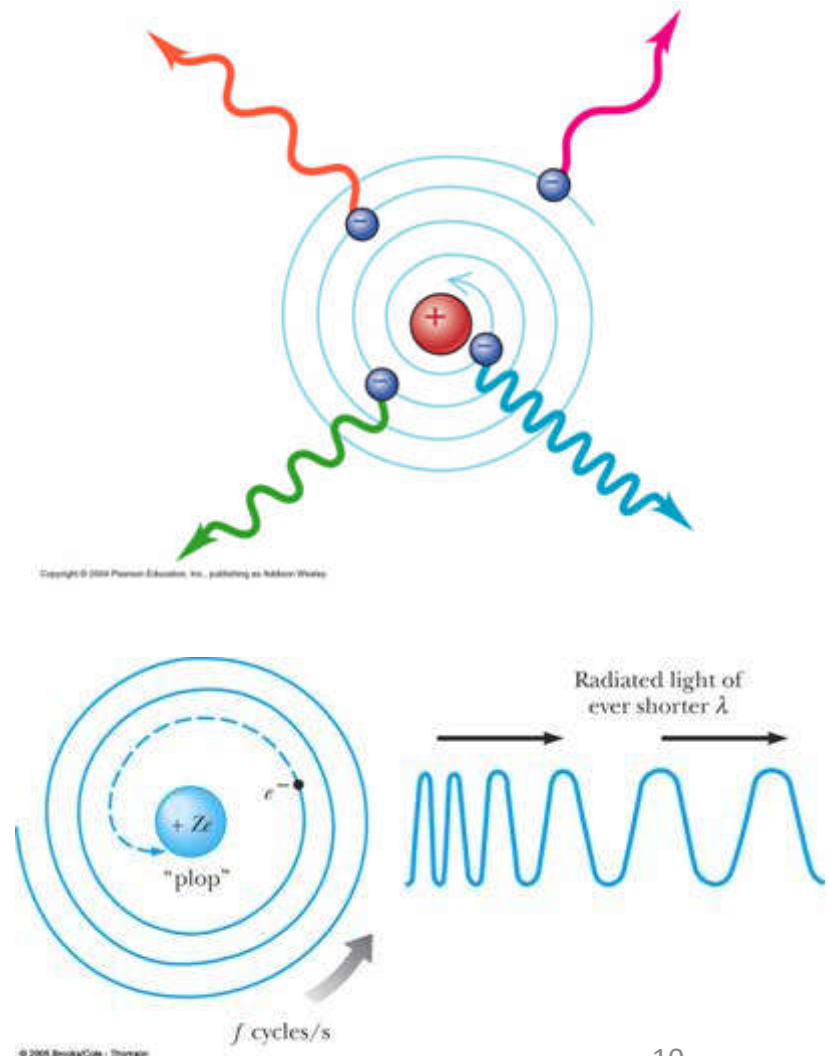
Le modèle planétaire de Rutherford (classique) est incapable d'expliquer la présence d'un spectre discontinu, il prévoit que l'énergie lumineuse émise varie de façon continue, mais le spectre de l'hydrogène est discontinu.

Dans le domaine de la lumière visible, ce spectre est constitué de 4 raies

**Ces deux conclusions sont en contradiction avec l'expérience**

## *Problème : Le spectre atomique*

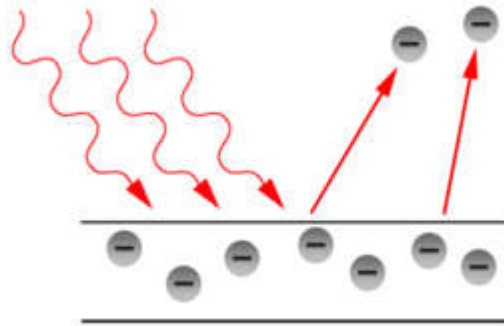
D'après la physique classique, un « modèle planétaire » dans lequel les électrons sont en orbites autour du noyau est mécaniquement stable mais selon la théorie de Maxwell, un électron en accélération (même centripète) émet un rayonnement. À cause de la perte d'énergie correspondante, l'électron devrait tomber sur le noyau en  $10^{-8}$  s, suivant une spirale.





## *Problème : l'effet Photoélectrique*

- Des électrons sont éjectés de certains métaux lorsque ceux ci sont éclairés !

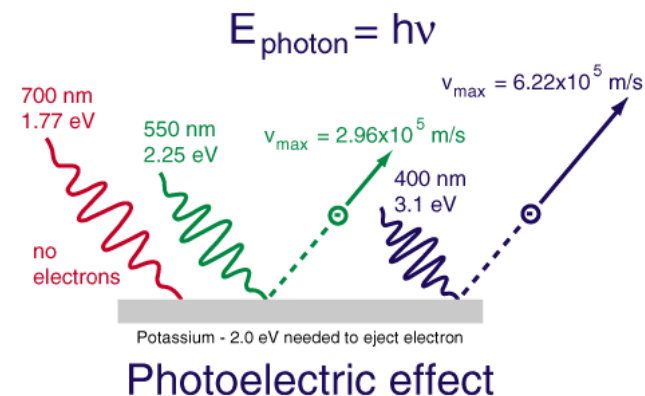


- Interprétation classique : résonance entre l'oscillation de l'onde de lumière et une oscillation (hypothétique) des électrons. Mais alors si on augmente l'intensité de l'onde les électrons devraient être éjectés plus facilement.

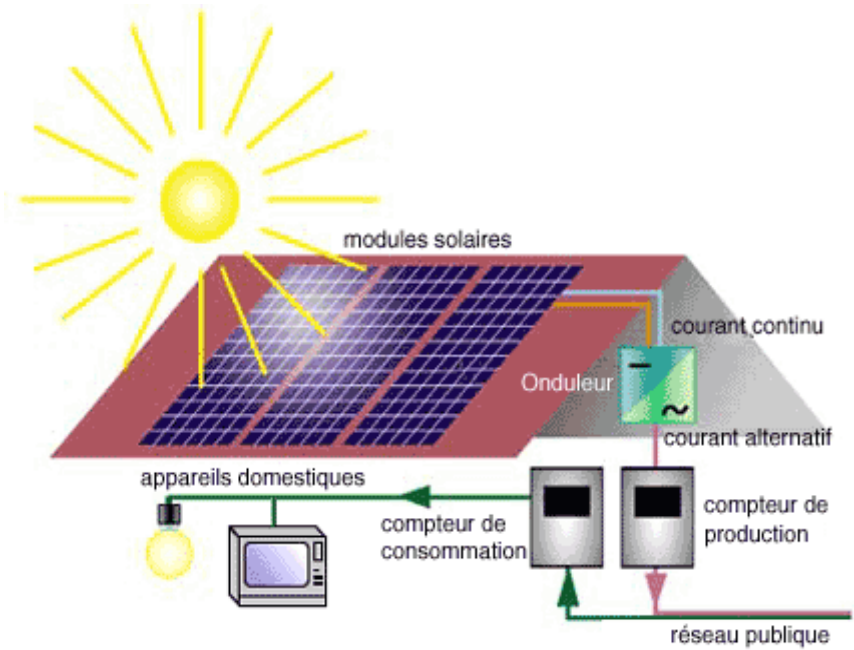
## *Explication de l'effet photoélectrique (Einstein 1905)*

- Si le photon est une particule il entre en collision avec les électrons dans le métal. Si son énergie est suffisamment forte pour surpasser l'énergie de liaison de l'électron, celui ci sera arraché (effet de seuil).
- Comme l'énergie du photon dépend de sa fréquence d'après la formule de Planck, il est normal que l'énergie cinétique de l'électron arraché augmente avec la fréquence
- On obtient l'équation simple pour l'énergie cinétique de l'électron :

$$E_{\text{cin}} = h\nu - E_{\text{extraction}}$$



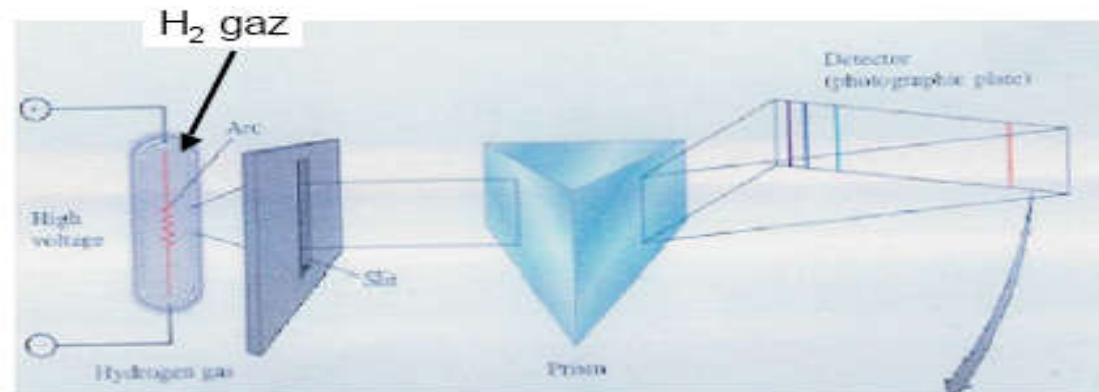
## *Effet photoélectrique (Einstein 1905)*



## *Preuve de la discontinuité de l'énergie de l'atome d'hydrogène*

- Une lampe à hydrogène est un tube cathodique dans lequel le gaz résiduel est de l'hydrogène maintenu à basse pression.
- En envoyant une décharge électrique dans le tube, une partie des atomes d'hydrogène acquièrent de l'énergie (sont *excités*) en entrant en collision avec les rayons cathodiques (électrons).
- Les atomes excités libèrent de l'énergie (*relaxent*) sous forme de lumière.
- Si on fait passer cette lumière dans un prisme, on obtient d'étroites raies de couleur; c'est le spectre de raies.

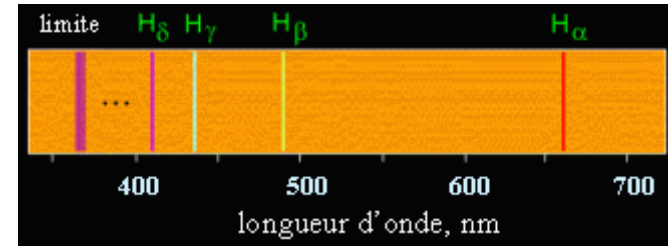
Une expérience bien connue au XIX<sup>ème</sup> siècle:



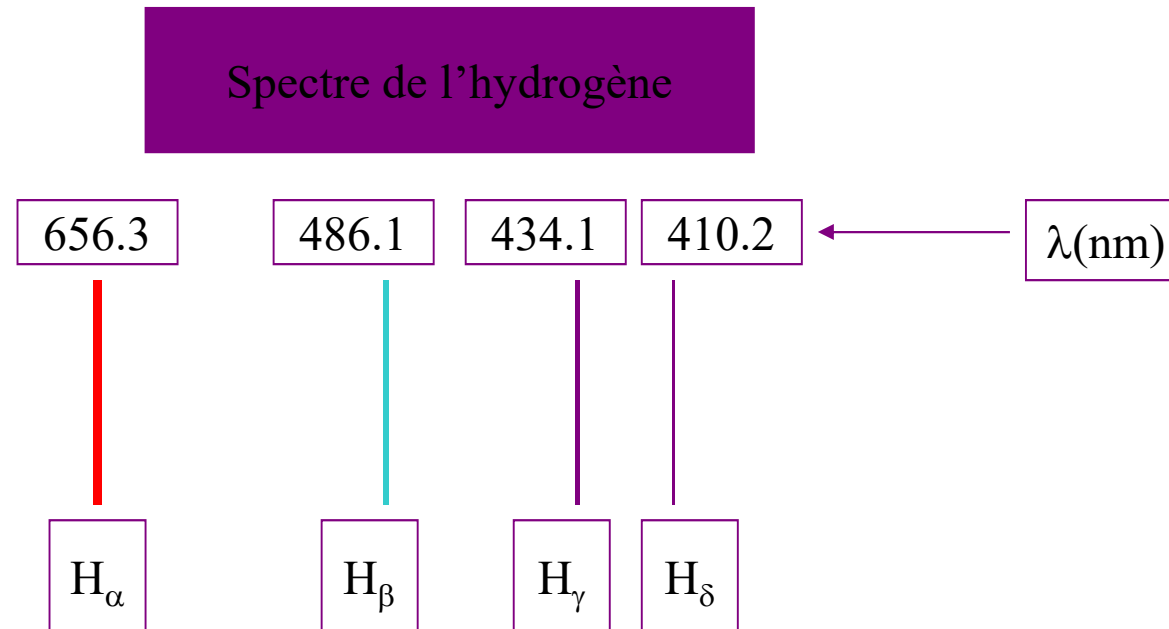
Un prisme disperse la lumière émise par de l'hydrogène soumis à une décharge électrique

# *Preuve de la discontinuité de l'énergie de l'atome d'hydrogène*

Ces raies ont l'avantage d'être naturellement groupées en séries; ce qui a facilité leur analyse. Quand on analyse la plaque, elle porte quatre raies situées dans le domaine du visible. (410, 434, 486 et 656nm)

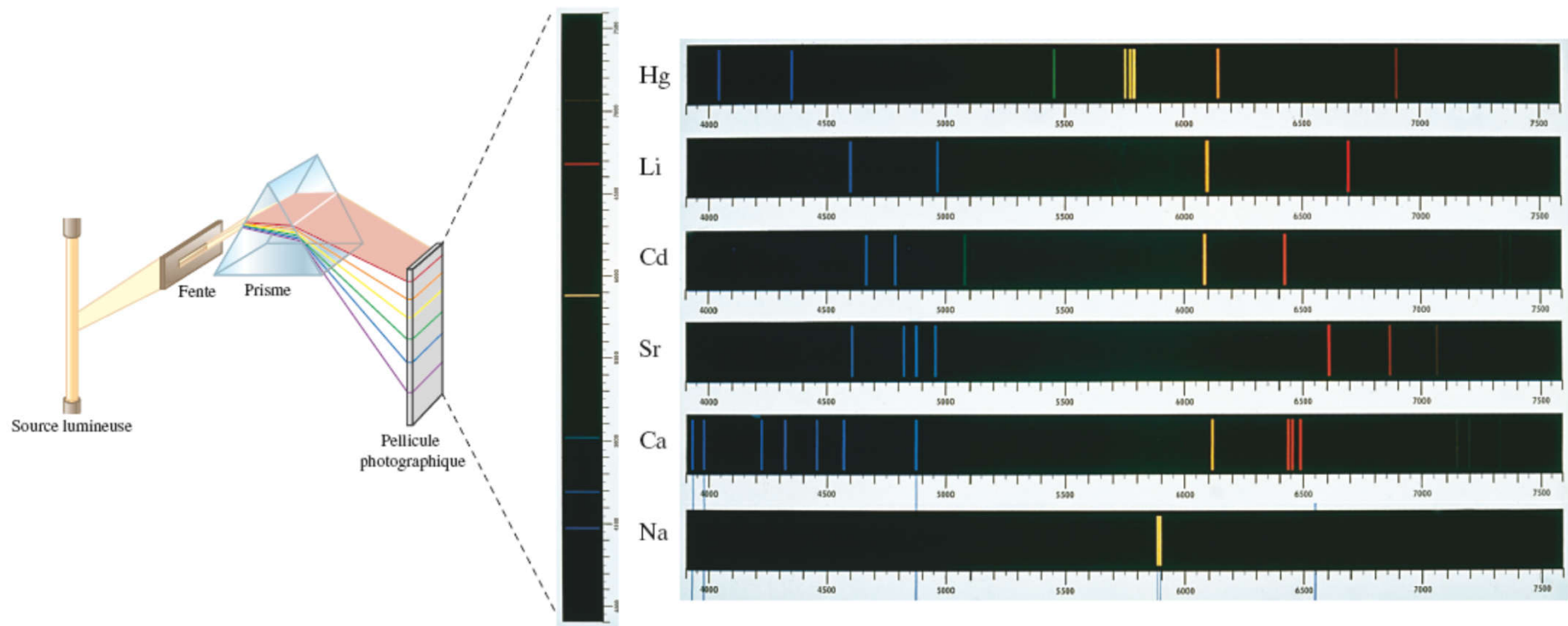


Spectre d'émission de l'atome H constitué de 4 raies (410, 434, 486 et 656nm)

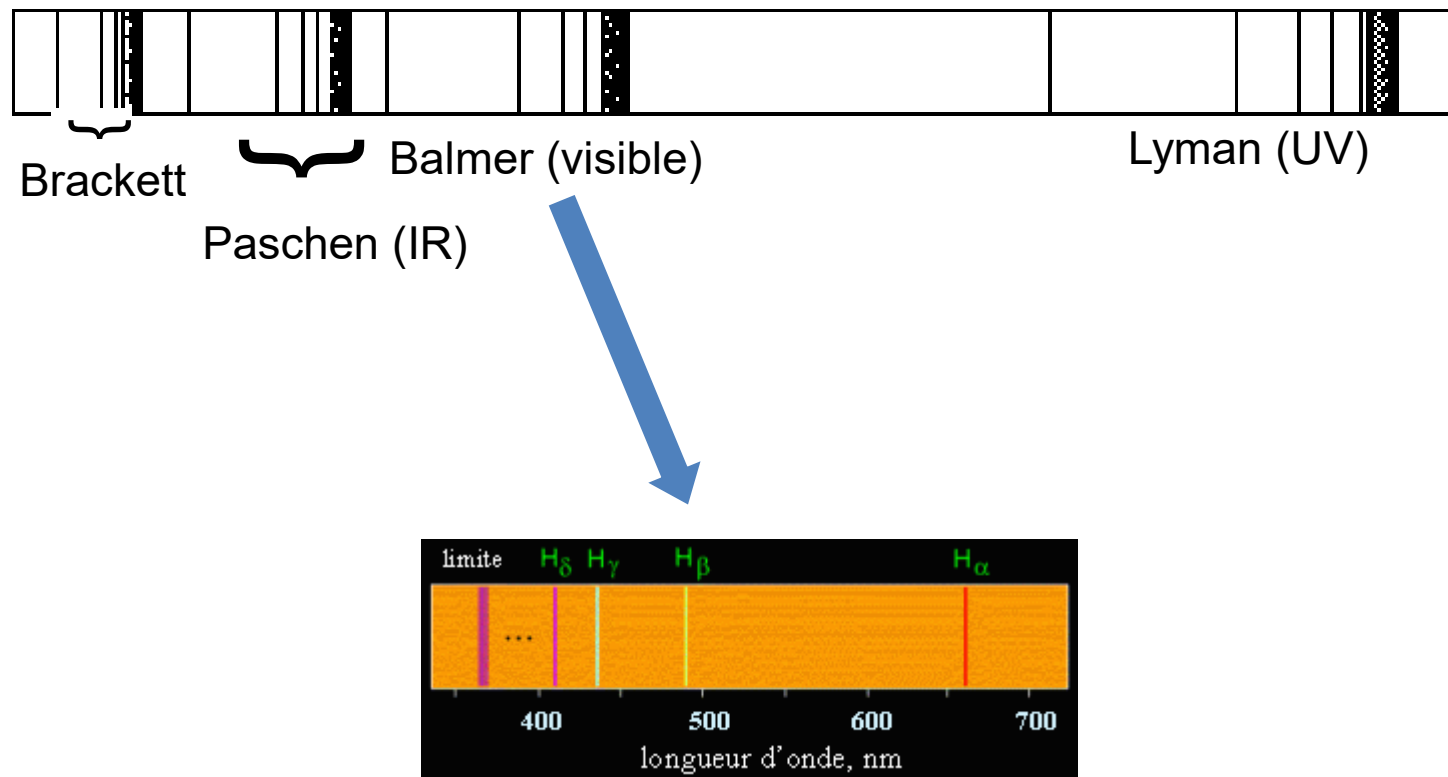


## *Le spectre discontinu où le spectre de raies*

Les éléments (atomes) possèdent un spectre caractéristique à chacun, qui se présente comme spectre discontinu, ou un **spectre de raies**.



# *Preuve de la discontinuité de l'énergie de l'atome d'hydrogène*



## Formule de Balmer et Ritz

A la fin du XIX<sup>e</sup> siècle, Balmer parvint à établir une formule empirique qui fournissait la longueur d'onde  $\lambda$  des raies du spectre de l'atome d'hydrogène connues à l'époque .

\* Balmer (1885) établit la relation suivante :

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

$R_H$  : constante de Rydberg = 109677,6 cm<sup>-1</sup>

$m$  : entier naturel  $m = 3, 4, 5 \dots$

$\sigma$  : nombre d'onde

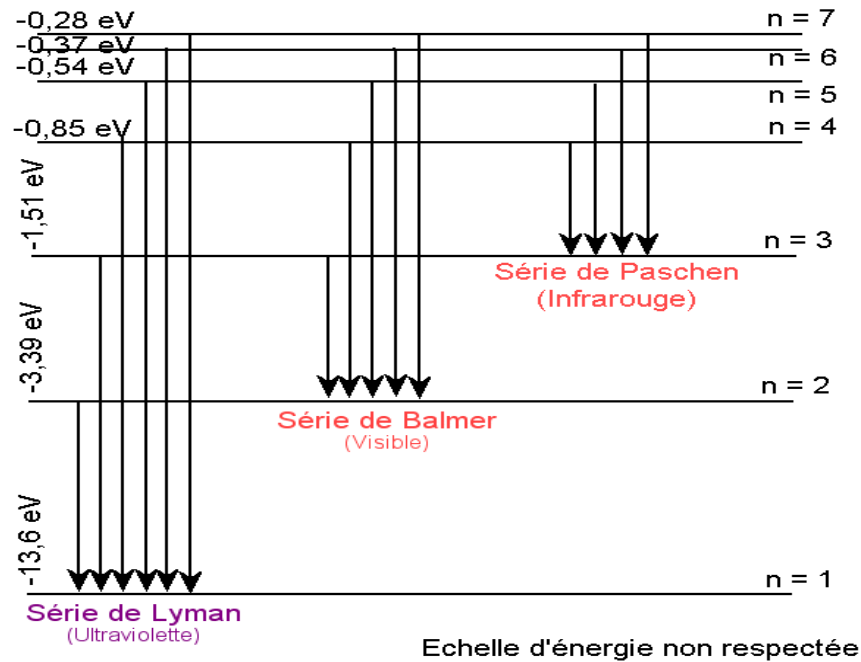
\* Ritz a généralisé la formule de Balmer :

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \text{ avec } m > n$$

Découverte de la série	Nom de la série	Niveau final n	Raie limite
1 906	Lyman	1	91
1 885	Balmer	2	364,3 nm
1 908	Paschen	3	820
1 922	Brackett	4	1 460



## Formule de Ritz



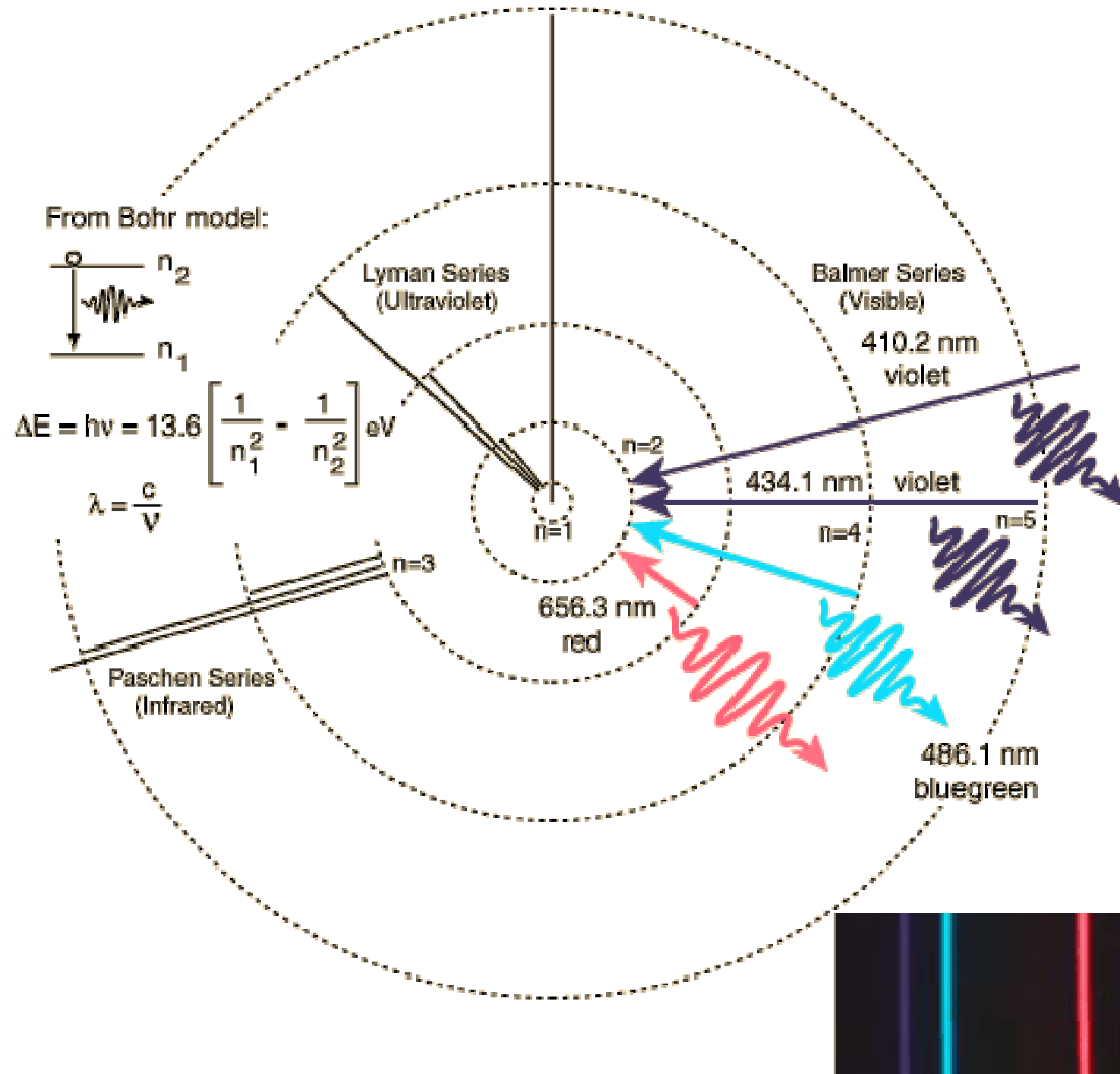
$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \text{ avec } m > n$$

$R_H$  : constante de Rydberg =  $109677,6 \text{ cm}^{-1}$

$m$  : entier naturel  $m = 3, 4, 5 \dots$

$\sigma$  : nombre d'onde

- Série de Lyman :  $n = 1$  et  $p > 1$  ( $p = 2, 3, \dots, \infty$ )
- Série de Balmer :  $n = 2$  et  $p > 2$  ( $p = 3, 4, \dots, \infty$ )
- Série de Paschen :  $n = 3$  et  $p > 3$  ( $p = 4, 5, \dots, \infty$ )
- Série de Brachett :  $n = 4$  et  $p > 4$  ( $p = 5, 6, \dots, \infty$ )
- Série de Pfund :  $n = 5$  et  $p > 5$  ( $p = 6, 7, \dots, \infty$ )



# *Modèle quantique*

# Max Planck (1858-1947)

## *Le photon : une particule de lumière*

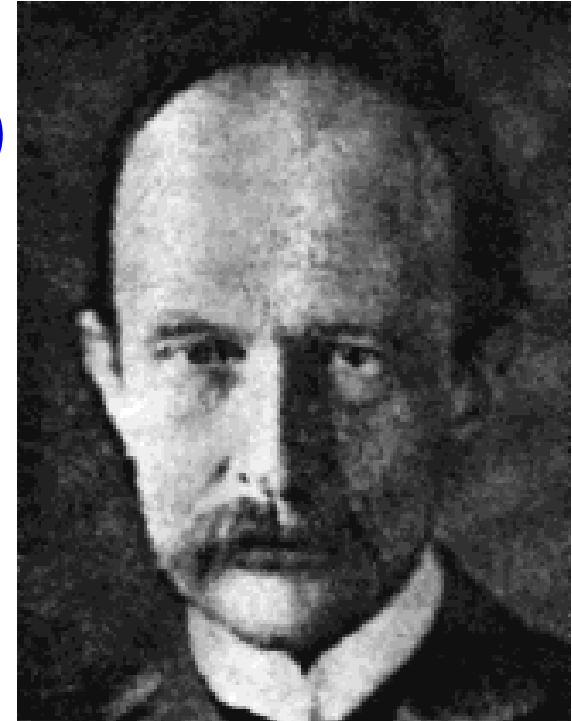
De la physique classique à la théorie des quantas, les modèles classiques sont insuffisants pour expliquer :

### ➤ Stabilité atomique

Il fallut beaucoup de temps pour comprendre que les lois classiques de la physique (newtonienne) ne s'appliquaient pas pour expliquer les phénomènes intramoléculaires

✓ Les atomes et molécules émettent ou absorbent de l'énergie que par multiples entiers d'une quantité minimale d'énergie appelée quantum.

**1900 : Max Planck montre la quantification des échanges d'énergie dans la matière**



# *Le quantum*

Partant de la théorie de Planck, chaque photon avait une quantité d'énergie

- Max Planck introduit l'idée de photon dans son étude théorique du corps noir. Chaque photon transporte une énergie proportionnelle à la fréquence de l'onde **qui lui est associée**.
- La plus petite quantité d'énergie qu'un atome peut absorber ou émettre est appelée **quantum**, et elle est donnée par  
est la fréquence de la lumière utilisée.

$$E = h\nu$$

- Il introduit la constante de proportionnalité « h » : constante de Planck

$$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

- Donc, l'hypothèse quantique suggère que l'énergie d'un rayonnement absorbée ou émise uniquement par quanta ou par **multiples entiers** d'un quantum.
- Donc, dans cette théorie, l'énergie varie de façon **discontinue**.

# Niels Bohr (1885-1962)

## *Neils Bohr à la rescousse*

➤ Neils Bohr (1885-1962) est sans doute l'un des savants les plus influents du XXe siècle, surtout en physique quantique. En 1922, il se voyait décerner le prix Nobel de physique pour ses travaux sur la structure de l'atome.

➤ 1923 : Niels Bohr réunit les concepts de Planck et de Rutherford: les orbites des électrons ont des rayons définis. L'énergie que peut prendre les électrons sont quantifiés.

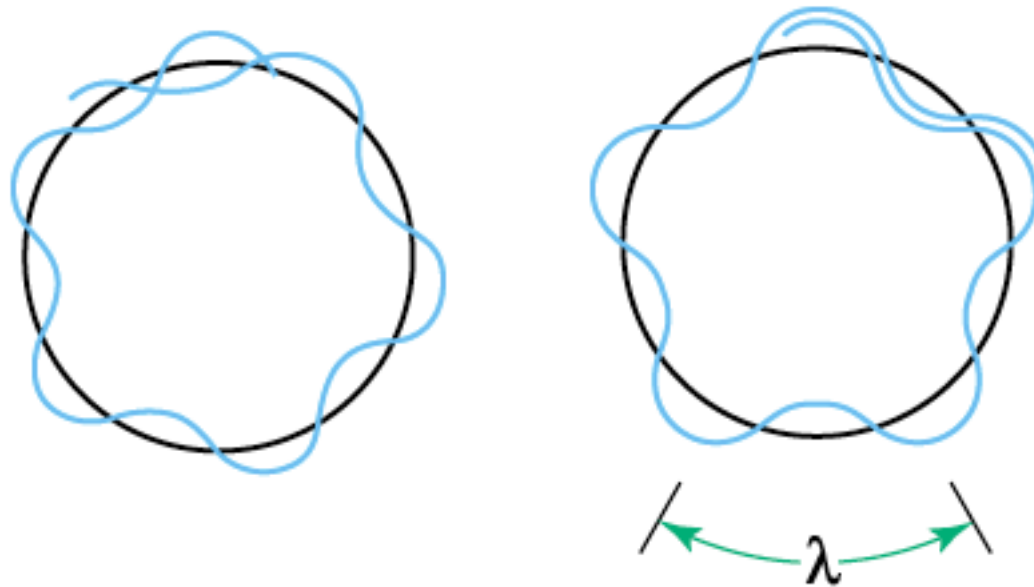


*Un modèle correct nécessite de nouvelles idées.*

## *Postulats de Bohr*

## *Le premier postulat de Bohr*

- Dans l'atome, le noyau est immobile, l'électron de masse  $m$  ne peut se trouver que sur des orbites privilégiées sans émettre de l'énergie ; on les appelle "orbites stationnaires".





## *Le second postulat de Bohr*

Émission d'un rayonnement seulement si l'électron passe d'une orbite permise supérieure à une orbite permise inférieure.

$$h\nu = E_i - E_f$$

où,  $h$  est la constante de Planck et  $E_i$  et  $E_f$  représentent l'énergie initiale ( $i$ ) et l'énergie finale ( $f$ ).

## *Le troisième postulat de Bohr*

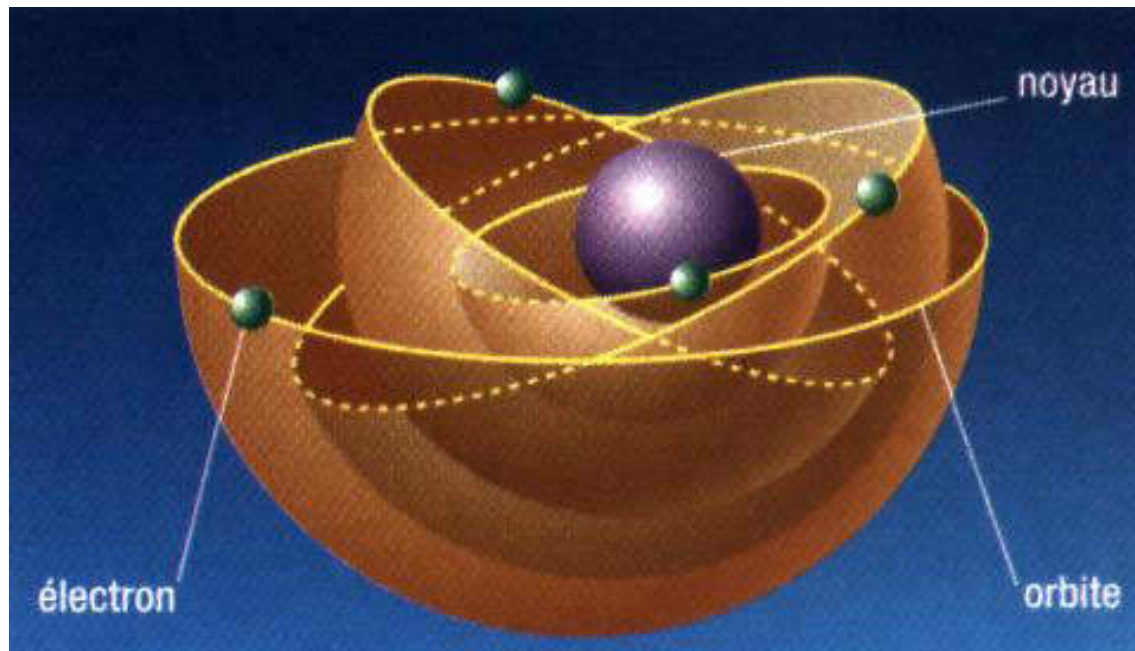
### *Quantification du moment cinétique*

Le moment cinétique de l'électron ne peut prendre que des valeurs entières multiples de  $\hbar$

$$l = mvr = n\hbar = \frac{nh}{2\pi} \quad (n = 1, 2, 3, 4\ldots)$$

# Niels Bohr

Modèle planétaire



# *Le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène*

Conservation du moment de la quantité de mouvement:

Moment angulaire :  $m.v.r = \text{constant}$

**Hypothèse de Bohr :**  $m.v.r = \frac{n.h}{2\pi}$  où  $n=1, 2, 3 \dots \infty$

$$mvr = n \frac{h}{2\pi} \Rightarrow (mvr)^2 = \left(n \frac{h}{2\pi}\right)^2$$

Donc :

$$mv^2 = \frac{n^2}{mr^2} \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \quad (3) \quad \frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon r^2} \quad (1)$$

En égalant (1) et (3) on aura :

$$r = \frac{n^2 h^2 \epsilon}{m \pi e^2} \quad (4)$$

C'est la rayon de l'orbite ou circule l'électron;  
Il est quantifié

# *Le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène*

Résolution du problème:

$$E = \frac{-e^2}{8\pi\epsilon r} \quad (2)$$

$$r = \frac{n^2 h^2 \epsilon}{m \pi e^2} \quad (4)$$

Si on remplace (4) dans (2), on obtient :

$$E = \frac{-me^4}{8\epsilon^2 h^2 n^2} \quad (5)$$

L'énergie totale d'un électron est donc discrète ou quantifiée

► Pour  $n = 1$  (état fondamental : l'électron occupe l'orbite de rayon  $r_1$  et d'énergie  $E_1$ )

$$r_1 = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,529 \text{ \AA} \quad (1\text{\AA} = 10^{-10} \text{ m})$$

$$E_1 = -21,78 \cdot 10^{-19} \text{ j} = -13,6 \text{ eV} \quad (1\text{eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ j})$$

► Pour  $n = 2$  (Premier état excité)

$$r_2 = 4r_1 = 2,116 \text{ \AA} \text{ et } E_2 = E_1/4 = -3,4 \text{ eV}$$

► Pour  $n = 3$  (Deuxième état excité)

$$r_3 = 9r_1 = 4,761 \text{ \AA} \text{ et } E_3 = -1,51 \text{ eV}$$

# ***Energie d'ionisation***

Le potentiel d'ionisation ou énergie d'ionisation d'un atome est l'énergie qu'il faut fournir à un atome neutre pour arracher un électron (le moins lié) à l'état gazeux et former un ion positif.

$$\blacktriangleright \text{Pour } n = \infty \quad \Rightarrow \quad E_{\infty} = 0 \text{ eV}$$

$\text{H} \rightarrow \text{H}^+ + 1\text{e}^-$  ionisation de l'atome d'hydrogène

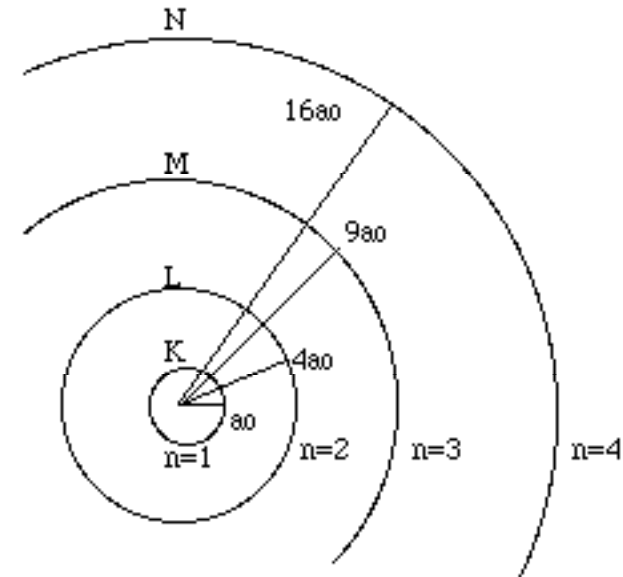
$$E = E_{\infty} - E_1 = 13,6 \text{ eV} \quad \text{avec } E_{\infty} = 0$$

# *Le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène*

**En conclusion:**

$$1) \quad r_n = n^2 \cdot r_1 = n^2 \cdot 0,5297 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$2) \quad E_n = \frac{-E_0}{n^2} = \frac{-21,757}{n^2} 10^{-19} \text{ J}$$



n=1, 2, 3, ...∞

# *Spectre de rayonnement de l'atome d'hydrogène*

Le passage de l'électron d'un niveau  $n_1$  à un niveau  $n_2$  s'accompagne d'une variation de l'énergie de l'atome ;

Si  $n_2 > n_1$ , l'atome absorbe de l'énergie et  $\Delta E = E_2 - E_1 > 0$

Si  $n_2 < n_1$ , l'atome émet de l'énergie et  $\Delta E = E_2 - E_1 < 0$

Et dans les deux cas :

$$\Delta E_{n_1 \rightarrow n_2} = \frac{m_e e^4}{8 h^2 \varepsilon_0^2} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Mais la fréquence de la lumière absorbée ou émise est liée la variation de l'énergie. D'après la relation de Planck et d'Einstein, on a :

$$|\Delta E| = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{m_e e^4}{8 h^2 \varepsilon_0^2} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Le nombre d'onde  $\sigma = 1/\lambda$  (cm<sup>-1</sup>), on obtient la formule de Ritz :

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = \frac{m_e e^4}{8 h^3 \varepsilon_0^2 C} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = R_H \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

On reconnaît là la formule donnant les spectres de l'atome d'hydrogène où  $R_H$  est la constante de Rydberg pour l'atome de l'hydrogène :

$$R_H = \frac{m_e e^4}{8 h^3 \varepsilon_0^2 C}$$



## *Généralisation aux ions hydrogènoïdes*

Ce sont des ions qui ne possèdent qu'un seul électron.

Exemple : He (Z=2) -----> He<sup>+</sup> (1e<sup>-</sup> et 2p)

Li (Z=3) -----> Li<sup>2+</sup>(1e<sup>-</sup> et 3p)

He<sup>+</sup> et Li<sup>2+</sup> sont des ions hydrogènoïdes. Leurs énergie totale s'écrit :

$$E_T = \frac{Z^2}{n^2} \frac{-me^4}{8\varepsilon^2 h^2 n^2}$$

$$E_T = E_1 \frac{Z^2}{n^2}$$

Avec  $E_1 = -13,6$  eV , l'énergie de l'atome d'hydrogène à l'état fondamental.

Le rayon d'une orbite de rang n d'un ion hydrogènoïde est :

$$r = \frac{n^2}{Z} \frac{h^2 \varepsilon_0}{m \pi e^2}$$

ou encore

$$r = r_1 \frac{n^2}{Z}$$

avec  $r_1 = 0,529$  Å ,

étant le rayon de l'atome d'hydrogène à l'état fondamental.

$$\frac{1}{\lambda} = \sigma = \frac{Z^2 m_e e^4}{8 c h^3 \varepsilon_0^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) = Z^2 R_H \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right)$$

## Exercice

Quelle est la longueur d'onde émise lorsqu'un électron passe du niveau initial  $n_i = 3$  au niveau final  $n_f = 2$  ? :

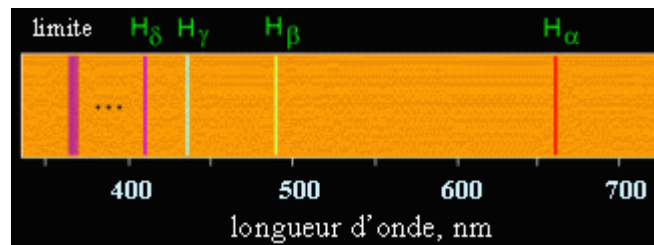
### Solution

$$\text{Ici } \Delta E = E_2 - E_3 = -3,40 - (-1,51 \text{ eV}) = -1,89 \text{ eV}$$

Alors:

$$\lambda = \frac{hc}{|\Delta E|} = \frac{1240 \text{ nm}}{1,89 \text{ (eV)}} = 656 \text{ nm}$$

(Soit la raie  $H_\alpha$ )



## *Exercice*

### Une des raies de Balmer pour l'atome d'hydrogène

- Quelle est l'énergie libérée par un atome d'hydrogène initialement à l'état  $n = 4$ , lorsqu'il se désexcite selon la série de Balmer ? (à exprimer en eV et en J)

$R_H$  : constante de Rydberg =  $109677,6 \text{ cm}^{-1}$

- Quelle est alors la longueur d'onde de la lumière émise ?  
(à exprimer en m ,  $\mu\text{m}$ ,  $\text{\AA}$ )

- Est-elle visible ?

# *Bohr en difficulté*

## Structure fine de l'hydrogène

Depuis 1887 (Michelson et Morley), on connaissait une structure fine de la raie  $H_{\alpha}$ . Aucune transition du modèle de Bohr ne peut expliquer cette présence !

## *Insuffisance de la théorie de Bohr*

Lorsqu'on place l'atome de l'hydrogène excité dans un champ magnétique, de nouvelles raies non prévues par la théorie de Bohr apparaissent sur le spectre.

Pour interpréter ce phénomène, Sommerfeld introduit un nombre quantique secondaire, appelé  $l$ , lié au nombre quantique principal  $n$  par la relation  $l \leq n-1$ .

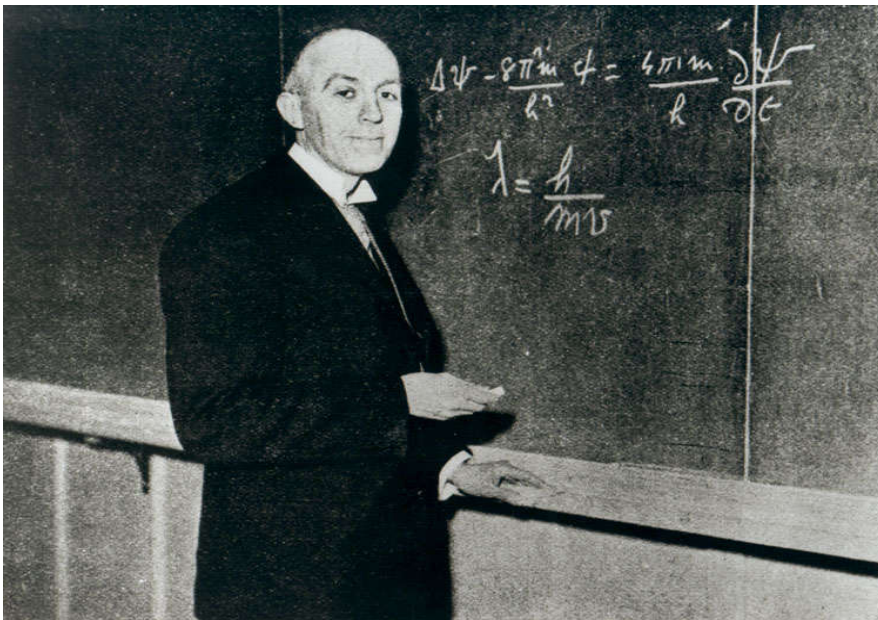
Toutefois, le modèle de Bohr, Sommerfeld ne pouvait pas décrire les spectres d'atomes autres que l'hydrogène. Ce modèle est remplacé par la théorie fondamentale de la physique atomique formulée par De Broglie, Heisenberg et Schrödinger : c'est la mécanique quantique ( ou ondulatoire) qui a conduit à la conception actuelle de la structure atomique.

*Principes généraux de la mécanique  
quantique*

## *Louis-Victor de Broglie (1892-1987)*

Les expériences de diffraction, réfraction et réflexion montrent que l'électron possède les caractéristiques d'une onde.

- ✓ L'électron est une particule aux caractéristiques ondulatoires.
- ✓ L'Onde Electromagnétiques est une onde aux caractéristiques corpusculaires: effet photoélectrique.



Puisque la lumière que l'on prenait pour une onde est aussi une particule, pourquoi les particules connues n'auraient-elles pas des comportements d'onde ?

C'est la **dualité onde / corpuscule**.

Le photon doit obéir simultanément à deux lois :

$$E = h \nu$$

(Planck)

$$E = m C^2$$

(Einstein)

$$h \nu = m C^2 \quad \Rightarrow \quad \nu = m C^2 / h$$

$$\nu = C / \lambda = m C^2 / h \quad \Rightarrow \quad \lambda = h / m C = h / p$$

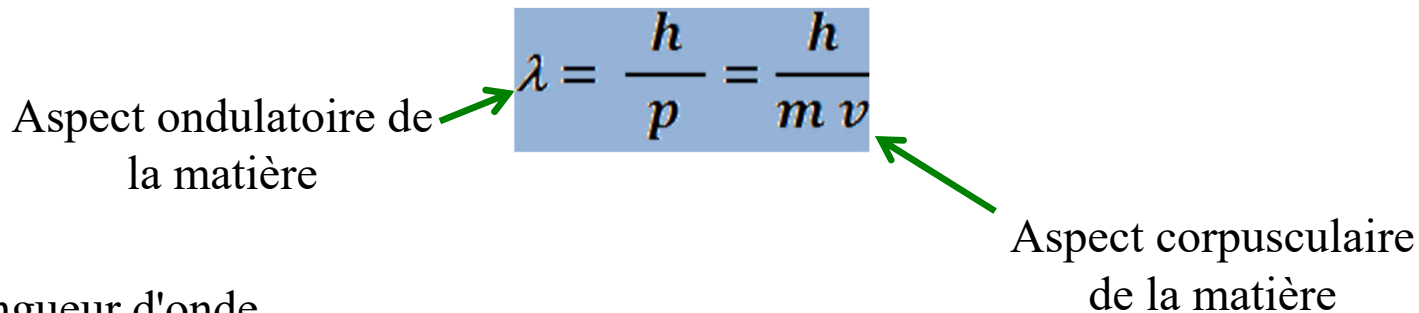


## Dualité onde - corpuscule :

### Postulat de Broglie

1923: A toute particule (corpuscule) de masse  $m$  et de vitesse  $v$  est associée une onde de longueur d'onde  $\lambda$ . On applique ainsi à la matière (exemple : un électron) le caractère combiné d'onde et de particule.

La longueur d'onde est déterminée par **la relation de De Broglie s'écrit :**



Aspect ondulatoire de la matière  $\rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \leftarrow$  Aspect corpusculaire de la matière

$\lambda$  : longueur d'onde

$h$  : constante de Planck

$mv$  : quantité de mouvement

- ✓ A l'échelle macroscopique ces ondes de De Broglie n'interviennent pas.
- ✓ En revanche les particules de très petite dimensions électrons - protons - atomes – molécules etc présentent bien un comportement ondulatoire.

# Principe d'incertitude d'Heisenberg

Si en mécanique classique, il est possible de déterminer simultanément la vitesse et la position d'une particule en mouvement, ceci n'est pas possible en mécanique ondulatoire.

Il est impossible de définir avec précision à la fois la position et la vitesse d'une particule.

Cela se traduit par la relation :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{2\pi}$$

$\Delta x$  : incertitude sur la position

$\Delta p_x = m \Delta v$  : incertitude sur la quantité de mouvement

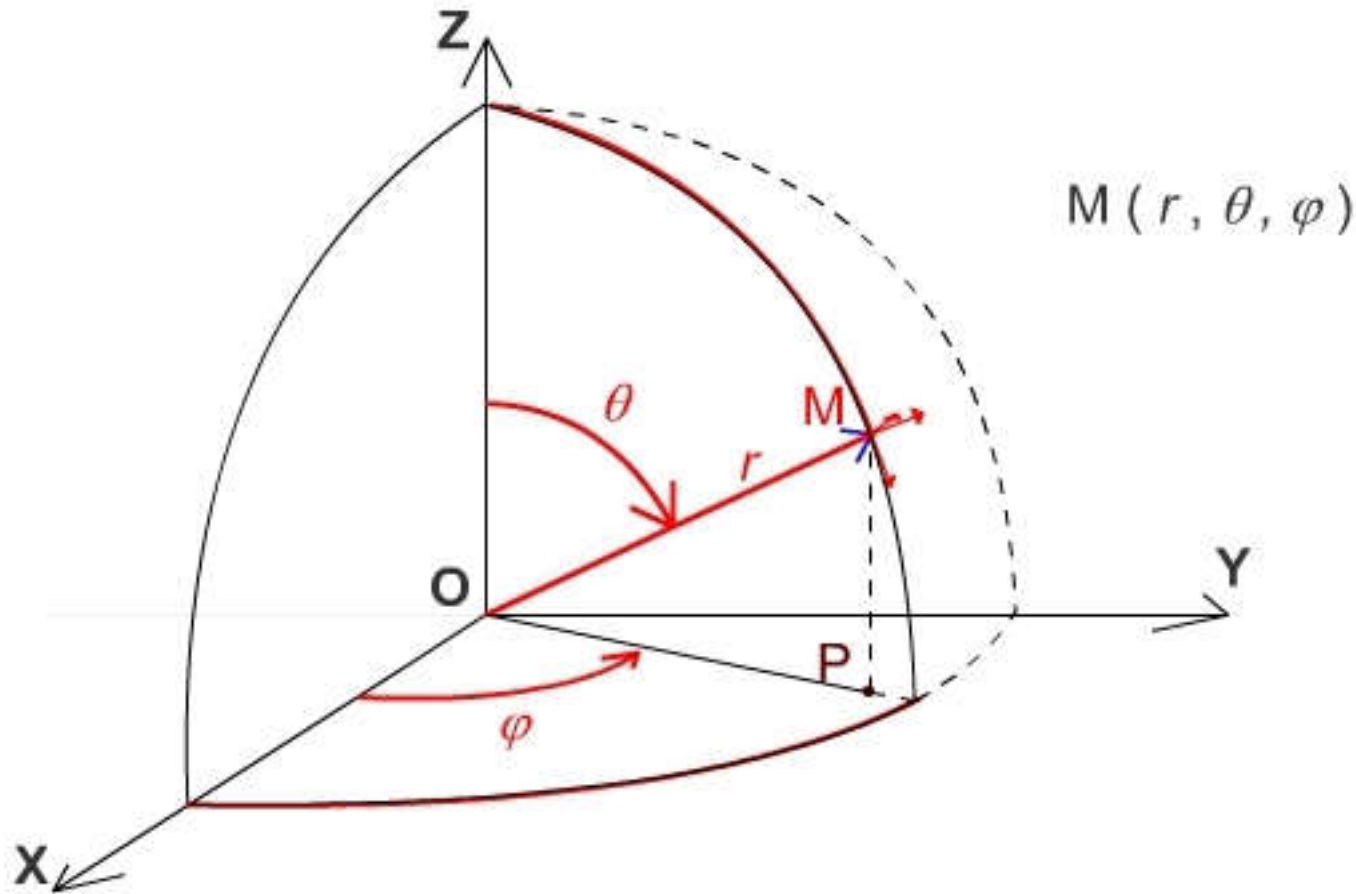
**Les électrons ne sont pas sur des orbites au sens de Bohr.**

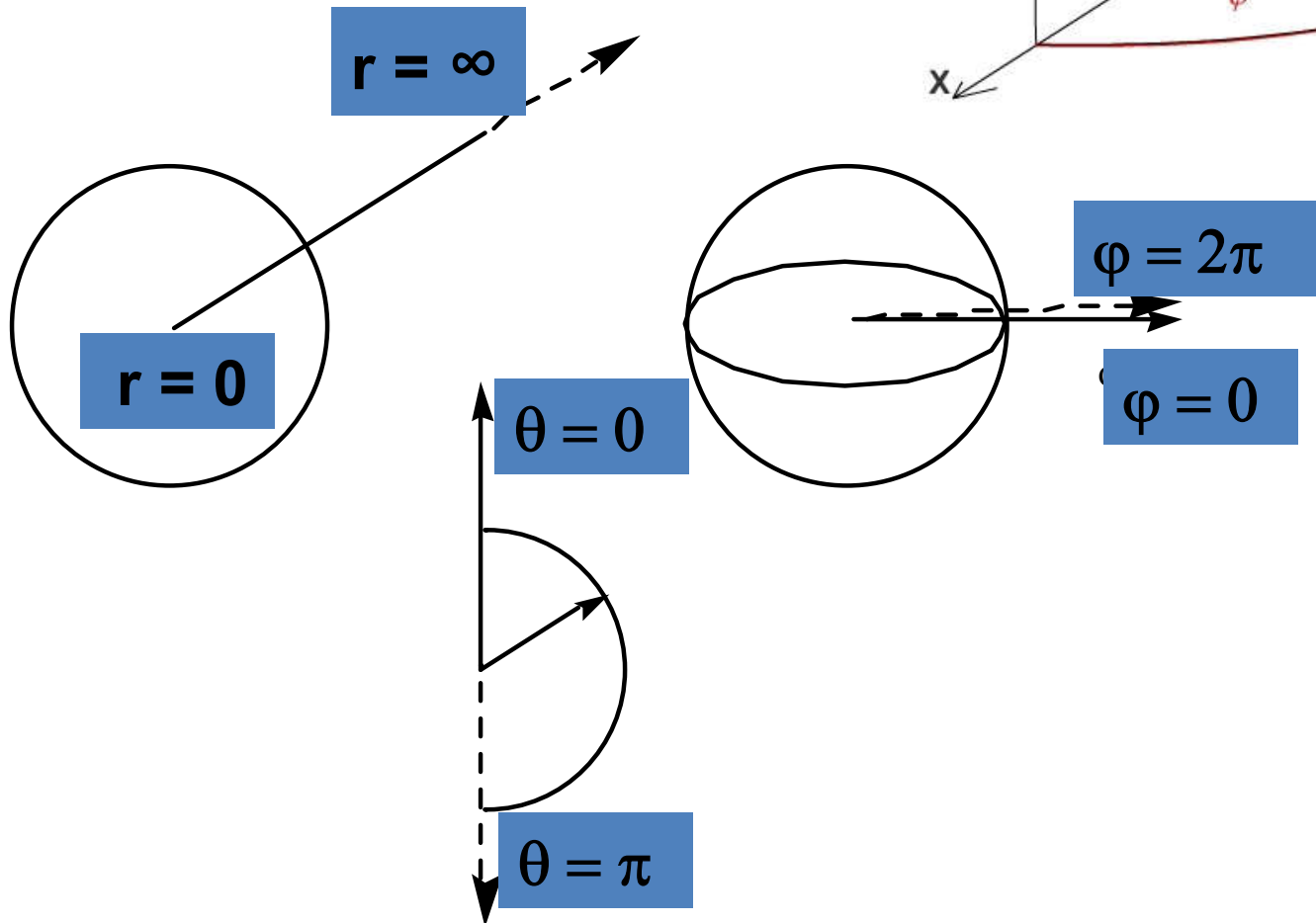
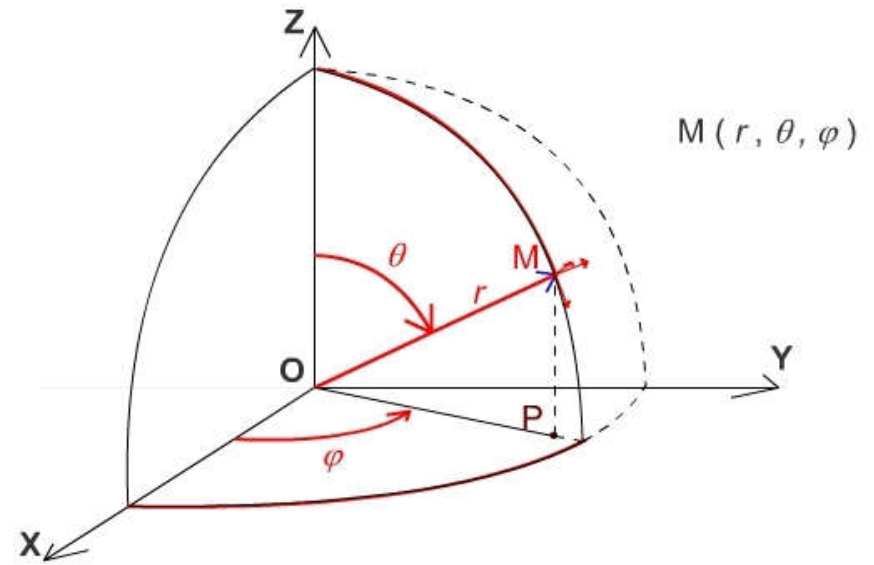
Cette relation établie par Heisenberg est connue sous le nom de principe d'incertitude, elle justifie l'utilisation de fonctions d'onde pour décrire la structure électronique de l'atome.

# Fonctions d'onde

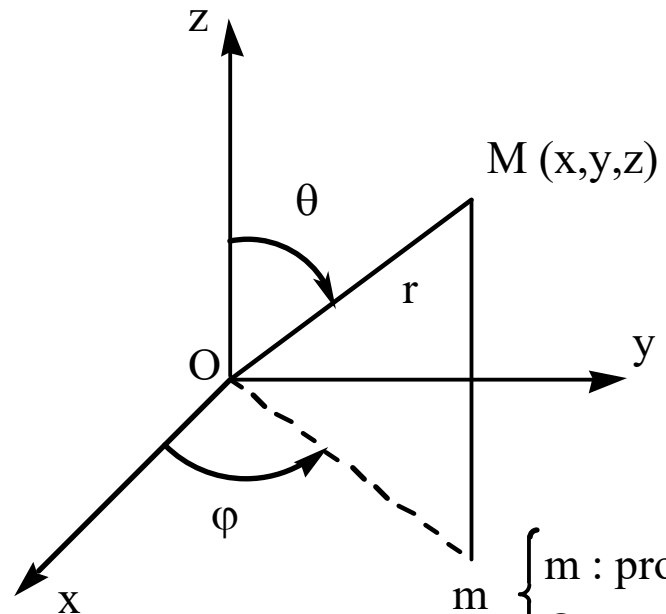
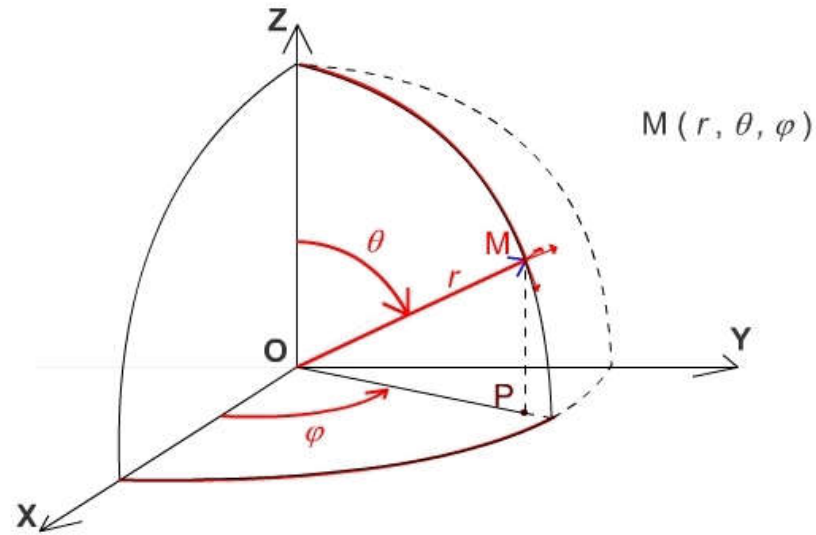
Le caractère ondulatoire de l'électron se décrit par une **fonction d'onde**  $\Psi$

A toute particule se trouvant à l'instant  $t$  au point  $M$  de coordonnées  $(x,y,z)$ , on associe une fonction d'onde  $\Psi(x,y,z,t)$  qui est une fonction réelle, complexe, positive, négative ou nulle,





## Symétrie sphérique



$$\begin{cases} x = r \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi \\ y = r \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi \\ z = r \cdot \cos \theta \end{cases} \quad \begin{cases} r \in [0, \infty[ \\ \theta \in [0, \Pi] \text{ (co-latitude)} \\ \varphi \in [0, 2\Pi] \text{ (longitude)} \end{cases}$$

$\begin{cases} m : \text{projeté orthogonal de } M \text{ dans le plan } [xOy] \text{ (plan équatoria} \\ Om = r \cdot \sin \theta \end{cases}$

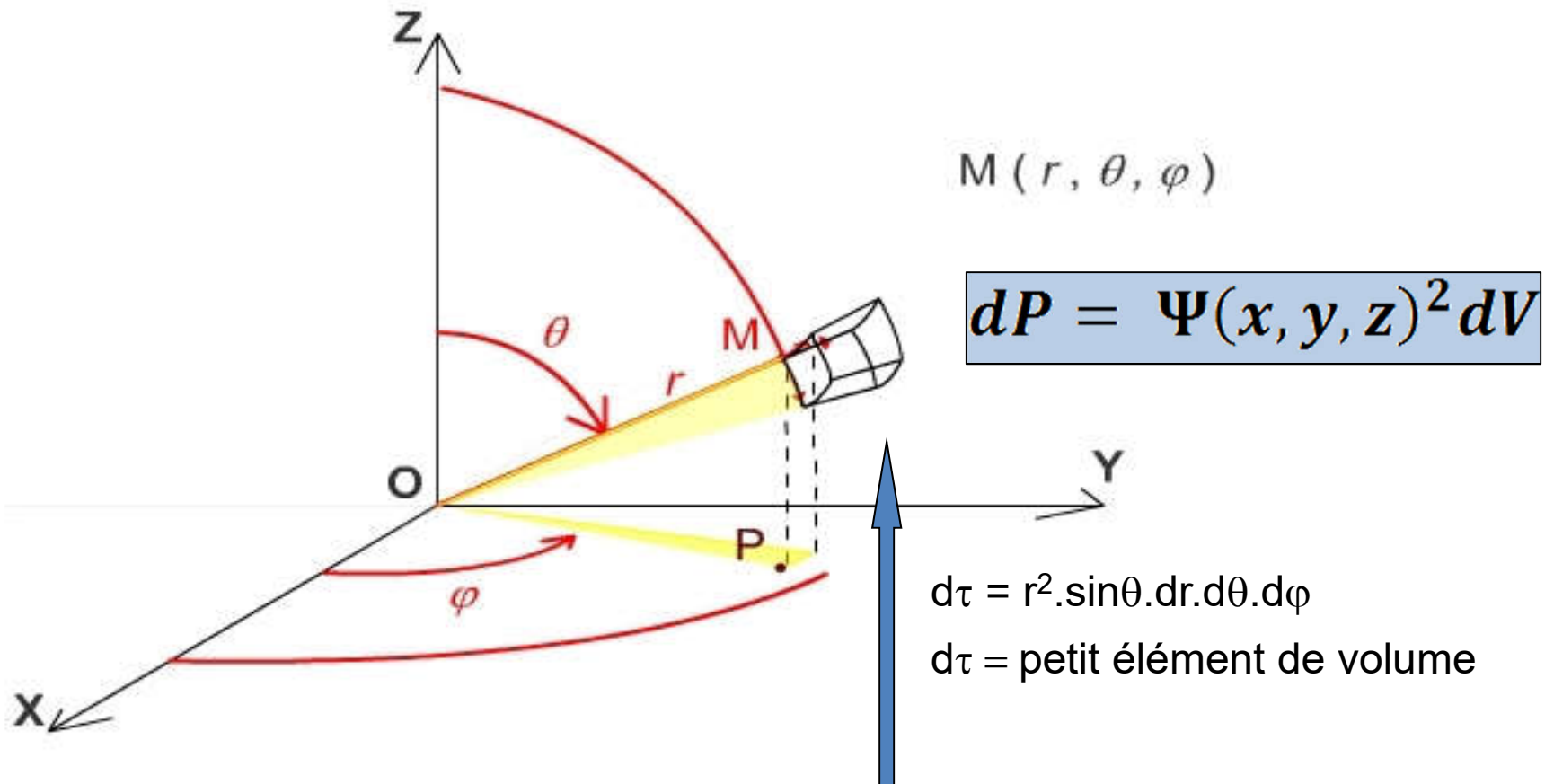
On écrit la fonction d'onde sous la forme

$$\boxed{\Psi(r, \theta, \varphi)}$$

## Notion de la probabilité de présence

A toute particule se trouvant à l'instant  $t$  au point  $M$  de coordonnées  $(x,y,z)$ , on associe une fonction d'onde  $\Psi(x,y,z,t)$  qui est une fonction réelle, complexe, positive, négative ou nulle, **L'électron ne possède pas de trajectoire**, Seule sa probabilité de présence  $\Psi^2$  est mesurable.

Le carré de son module  $|\Psi(\vec{r},t)|^2$  représente la probabilité de présence de la particule dans un élément de volume  $dv = dx.dy.dz$  :



## Notion de la probabilité de présence

$$P = \int dP = \iiint_{\text{tout l'espace}} \Psi^2(x, y, z) dx dy dz = 1$$

On dit que la fonction d'onde est normée.

En mécanique quantique, la notion de la trajectoire n'existe plus pour l'électron. **Elle est remplacée par la notion de probabilité de présence.**

Cela amène à abandonner la notion de trajectoire (orbite) précise de l'électron autour du noyau et de la substituer par la notion d'orbitale atomique (OA) : région de l'espace, définie par la fonction mathématique  $\Psi$ , où la particule a une probabilité de présence  $dP$ .

# Erwin Schrödinger (1887-1961)

- En mécanique classique (conception de Bohr), l'étude du mouvement d'un électron consiste à rechercher sa trajectoire avec précision, par contre en mécanique quantique on parle de la probabilité de trouver l'électron en un certain point de l'espace.
- Cette délocalisation dans l'espace est donnée par une fonction des coordonnées de l'électron appelée fonction d'onde  $\Psi$ .
- En mécanique quantique, **l'électron** n'est plus décrit par les vecteurs position et vitesse. Il est décrit par une **fonction d'onde**, notée  $\Psi$



$$H\Psi = E.\Psi$$

Les électrons sont comme des papillons autour d'une lampe. Ils sont confinés dans une zone de l'espace qu'on appelle orbitale.

**1926 : Schrödinger modélise l'électron comme une onde, l'électron dans l'atome n'est donc plus une corpuscule classique mais est décrite par une fonction d'onde.**



## *Calcul de $\Psi$ : L'équation de Schrödinger*

On dispose de la définition de  $\Psi$ , et de sa propriété d'être normée.

Il reste à en calculer l'expression mathématique.

Cela se fait grâce à l'**équation de Schrödinger** (1926), dont la résolution et le détail n'est pas au programme.

$$H(\Psi) = E.\Psi$$

Les termes en bleu sont les inconnues :

- la fonction d'onde  $\Psi$
- et son énergie  $E$  associée

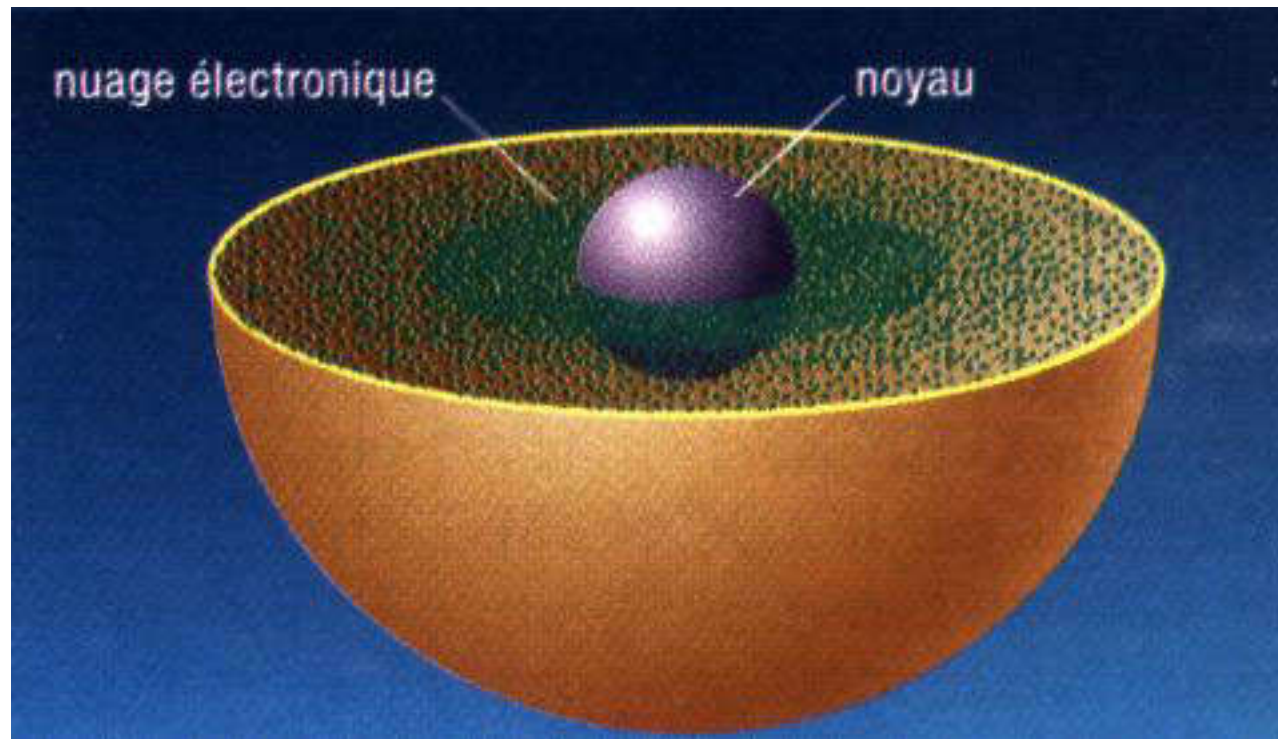
Ce qui est connu est **l'hamiltonien**  $H$  du système, qui est l'équivalent en mécanique quantique de **l'énergie mécanique** (somme de l'énergie cinétique + énergie potentielle du système:  $V$ ) utilisée en mécanique classique.

$$H = \frac{-\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta + V$$

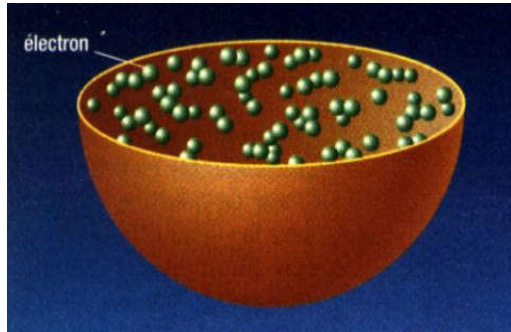
$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Le laplacien

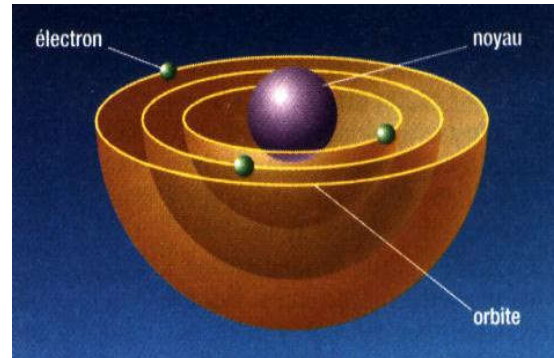
# L'atome selon Schrödinger



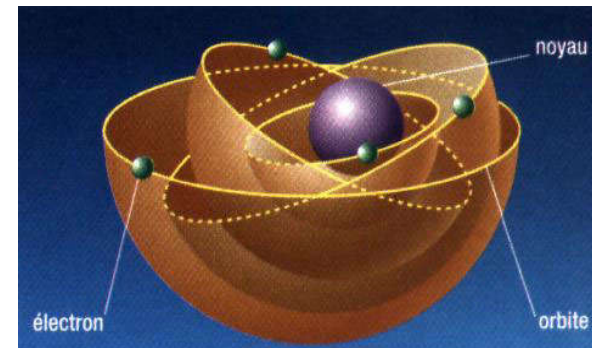
## L'atome selon Thomson



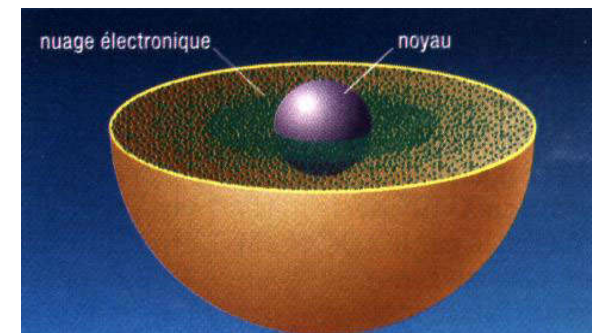
## L'atome selon Rutherford



## Niels Bohr



## L'atome selon Schrödinger



## Modèle quantique (ondulatoire) de l'atome et Orbitales atomiques

- La localisation des électrons d'un atome par rapport au noyau est décrite par des **fonction d'onde** nommées également **orbitales atomiques OA**
- (OA) : région de l'espace, définie par la fonction mathématique  $\Psi$ , où la particule a une probabilité de présence
- La fonction d'onde  $\Psi(r)$ , solution de l'équation de Schrödinger, est aussi appelée fonction propre.
- C'est une fonction mathématique qui définit la région propre  
C'est une fonction mathématique qui définit la région de l'espace dans laquelle évolue l'électron autour du noyau (OA). Chaque fonction d'onde est caractérisée par 3 paramètres  $n$ ,  $l$  et  $m$ , appelés nombre quantiques

# *Nombres quantiques*

## Solution de l'équation

Au cours de la résolution de l'équation apparaissent 3 nombres quantiques entiers , plus un 4<sup>ème</sup>, lié au spin de l'électron.

- ✓ le nombre quantique principal :  $n$  (entier)  $n > 0$
- ✓ le nombre quantique orbital :  $l$  (entier)  $l \in [0, n-1]$
- ✓ le nombre quantique magnétique :  $m$  (entier)  $m \in [-l, +l]$
- ✓ le nombre quantique magnétique de spin  $m_s = +\frac{1}{2}$  (notation  $\uparrow$ ) ou  $-\frac{1}{2}$  ( $\downarrow$ )

Les solutions  $\Psi$  de l'équation sont appelées **orbitales atomiques** (OA), dépendent des 3 premiers nombres quantiques et sont notées  $\Psi_{n,l,m}$

Les énergies  $E$  associées **ne dépendent que de  $n$** , et on retrouve l'expression obtenue par l'exploitation des spectres d'émission.

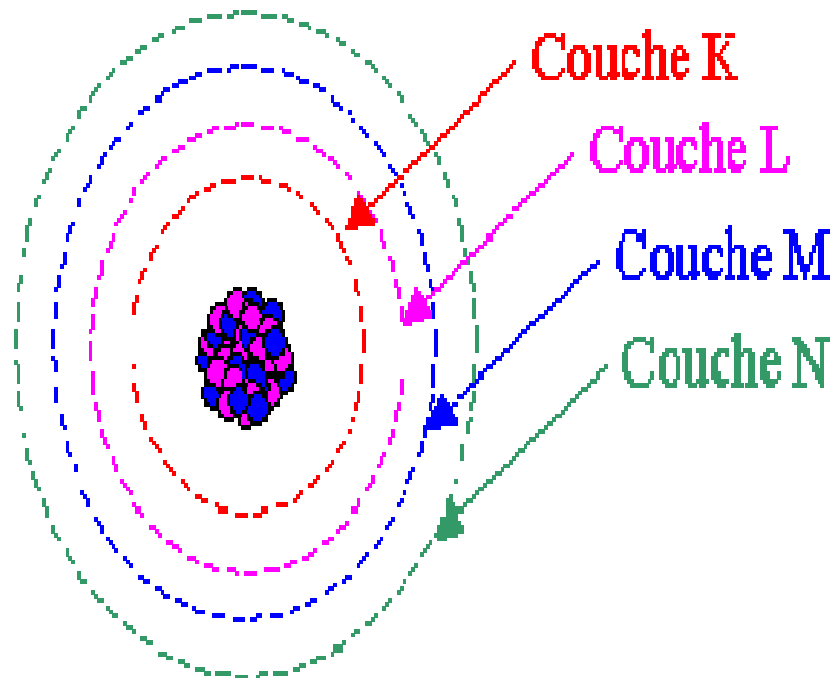
Une notation couramment utilisée pour nommer les OA se sert du tableau

$l$	<b>0</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	4...
Notation	<b>s</b>	<b>p</b>	<b>d</b>	<b>f</b>	g...
origine spectroscopique	sharp	principal	diffus	fondamental	

# Combinaisons permises des quatre nombres quantiques

Chaque électron d'un atome doit être caractérisé par une combinaison des quatre nombres quantiques  **$n$ ,  $l$ ,  $m_l$ ,  $m_s$**

**$n$** : nombre quantique principal (entier positif et différent de 0). Il définit le niveau d'énergie ou la couche électronique. Il est d'usage de désigner ces couches par les lettres K,L,M,N lorsque  **$n$**  prend respectivement les valeurs 1,2,3,4,.....

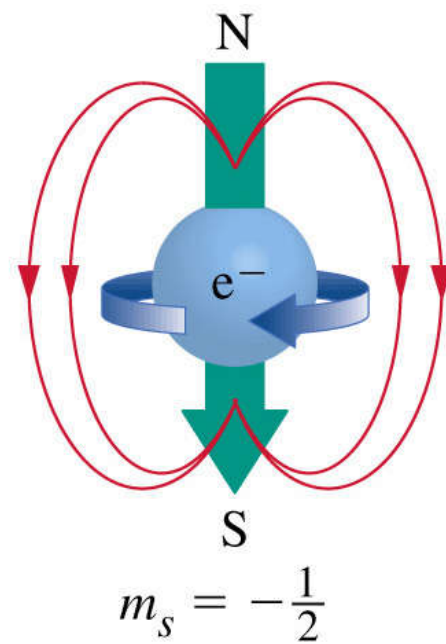
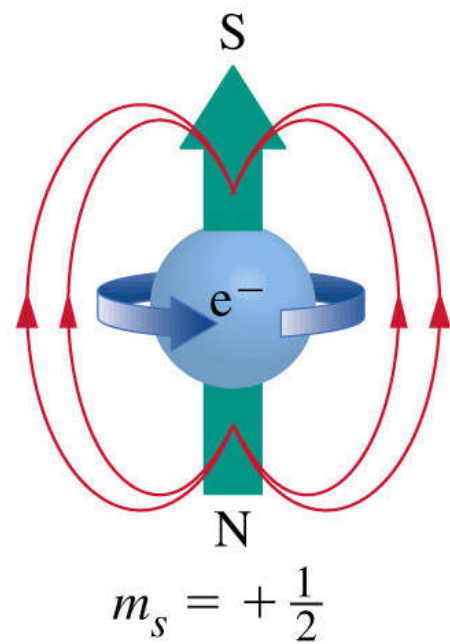


# Combinaisons permises des quatre nombres quantiques

Sachant que le nombre quantique principal,  $n$  prend les valeurs allant de 1 à l'infini, on en déduit que:

- Pour un nombre quantique principal,  $n$ , les valeurs permises du nombre quantique secondaire ou azimutal  $l$  qui définit la sous-couche électronique et la symétrie de cette sous couche, sont comprises entre 0 et  $n-1$ ;
- Pour ce nombre quantique secondaire  $l$ , le nombre quantique magnétique ,  $m_l$ , qui définit l'orbitale atomique (OA) ou la case quantique (représentée par un carré), ne peut valoir que  $-l \leq m_l \leq +l$ , soit  $(2l+1)$  valeurs différentes pour chaque valeur de  $l$ ;
- Pour un nombre quantique magnétique ,  $m_l$ , le nombre quantique de spin,  $m_s$  ne peut avoir que soit  $-1/2$  et  $+1/2$ .





# ***Structure électronique des atomes***

*équation à résoudre :  $H(\Psi) = E.\Psi$*

Dans l'hamiltonien  $H$ , l'énergie potentielle contient des termes de *répulsions* entre les électrons, et *d'attraction* entre électrons et protons.

L'équation  $H \Psi = E \Psi$  ne peut être *résolue exactement que si le terme de répulsion disparaît*. C'est le cas des atomes **monoélectroniques** (un seul électron) : hydrogène et hydrogénoïdes

Pour tous les autres atomes (**polyélectroniques**) la résolution ne peut se faire que de manière approchée.

# Atome d'hydrogène en mécanique quantique

L'atome d'hydrogène étant uniquement constitué d'un proton et d'un électron, le système étudié se limite à l'interaction entre ces deux charges distantes l'une de l'autre d'une longueur  $r$ . Son énergie potentielle  $V(r)$  est donnée par :

$$V(r) = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

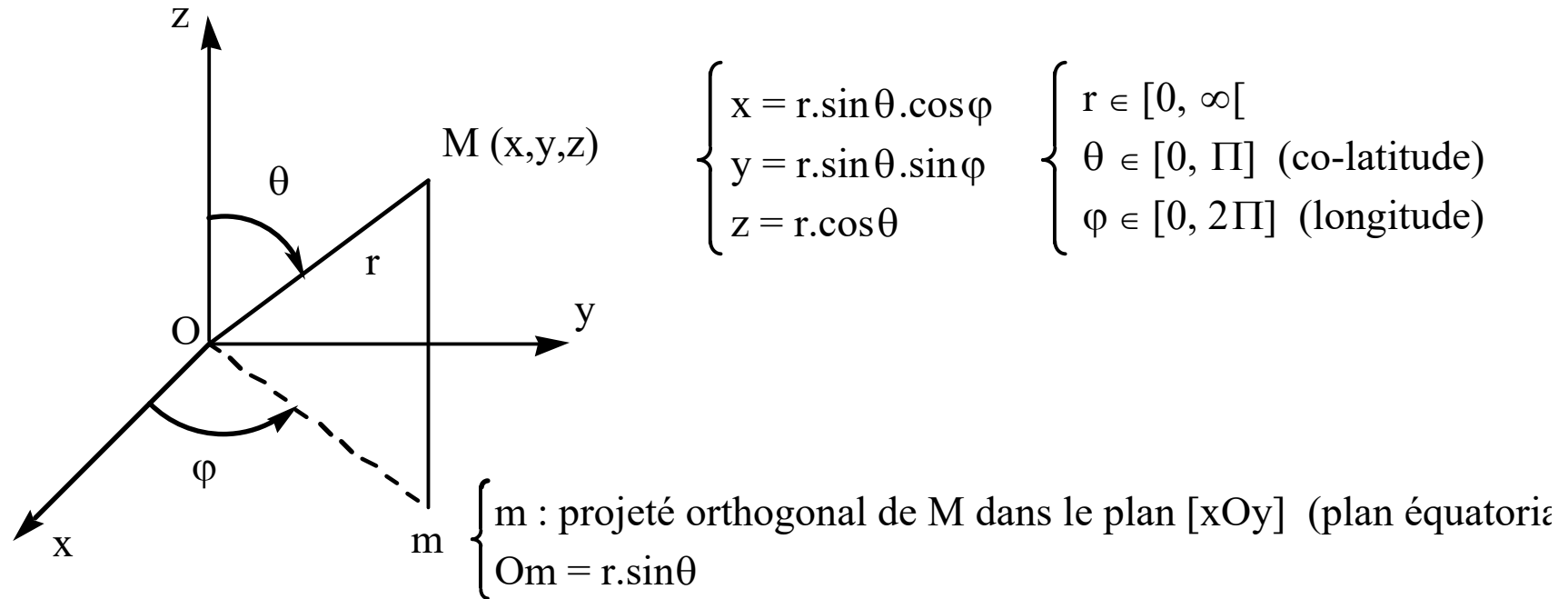
L'équation de Schrödinger en coordonnées cartésiennes s'écrit alors :

$$\left( \frac{-h^2}{8\pi^2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = E \Psi(x, y, z)$$

Pour résoudre cette équation, il est préférable de passer en coordonnées sphériques  $r$ ,  $\theta$  et  $\varphi$ , le proton est placé à l'origine du référentiel de l'électron au point M de coordonnées :

# L'atome d'hydrogène en mécanique quantique

## Symétrie sphérique



On écrit la fonction d'onde sous la forme

$$\boxed{\Psi(r, \theta, \varphi)}$$

# Atome d'hydrogène en mécanique quantique

La relation précédente devient alors :

$$\left( \frac{-\hbar^2}{8\pi^2 m r^2 \sin\theta} \left[ \sin\theta \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = E \Psi(x, y, z)$$

$$\text{avec : } \Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Les solutions de cette équation sont de la forme :

$$\Psi_{(n,l,m)}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \times \Theta_{l,m}(\theta) \times \varphi_m(\varphi) = R_{n,l}(r) \times Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

$R_{n,l}(r)$  : partie radiale

$Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  : partie angulaire

## L'atome d'hydrogène en mécanique quantique

$\Psi(r,\theta,\varphi)$  s'écrit sous la forme

$$\boxed{\Psi(r,\theta,\varphi) = R(r).Y(\theta,\varphi)}$$

$R(r)$  : fonction de la distance à l'origine  
= distance de l'électron au noyau

$Y(\theta,\varphi)$  : fonction de la direction dans laquelle  
on regarde

$\Psi(r,\theta,\varphi)$  dépend de 3 paramètres, ou encore **nombre quantiques : n, l, m**

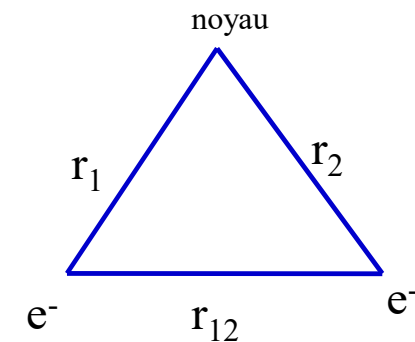
$$\boxed{\Psi_{n, l, m}(r,\theta,\varphi)}$$

# Atomes à plusieurs électrons

## Equation de Schrödinger

Prenons le cas de l'atome d'hélium à 2 électrons : en considérant que le noyau est fixe, notons  $r_1$  et  $r_2$  et  $r_{12}$  les distances des 2 électrons au noyau et la distance entre ces 2 électrons.

L'énergie potentielle du système est égale à :



$$V = -\frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

L'énergie cinétique sera la somme des énergies cinétiques des 2 électrons :

$$E_c = \frac{1}{2m}(P_1^2 + P_2^2)$$



# Atomes à plusieurs électrons

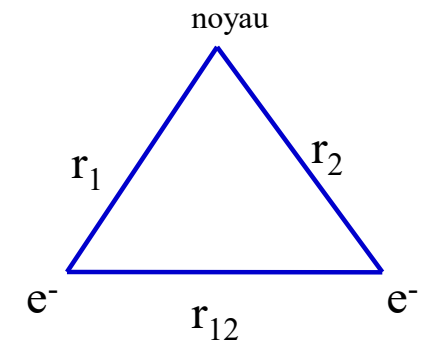
On en déduit l'Hamiltonien H de l'atome d'He :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{r_{12}}\right)$$

$\Delta_1$  et  $\Delta_2$  étant les laplaciens des 2 électrons.

L'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$



Dans cet expression  $\Psi$  dépend des coordonnées des 2 électrons  $\Psi = \Psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$  que l'on écrit plus simplement  $\Psi = \Psi_{(1,2)}$

La résolution mathématique d'un tel problème est impossible et l'on doit faire appel à des approximations.

## Résolution approchée

La première hypothèse que nous avons utilisée, consiste à considérer le noyau comme immobile : c'est l'approximation Born-Oppenheimer.

La deuxième hypothèse consiste à se ramener à un résultat comme celui des hydrogénoïdes.

Raisonnons sur l'atome de l'He : chaque électron est soumis à une force attractive de la part du noyau de charge  $+2e$  et à une force de répulsion de la part de l'autre électron de charge  $-e$ . on peut remplacer ces forces par une force unique due à l'attraction du noyau sur l'électron mais la charge du noyau était une charge fictive  $2-\sigma$ .

On appelle  $\sigma$  constante d'écran.

## Résolution approchée

Moyennant cette approximation, l'Hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = -\frac{\tilde{h}^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{2 - \sigma_1}{r_1} + \frac{2 - \sigma_2}{r_2} \right)$$

Ici  $\sigma_1 = \sigma_2$  constante d'écran relatives aux deux électrons.

$\hat{H}$  est la somme de 2 termes :

L'Hamiltonien 1 ne dépend que de l'électron 1 et l'Hamiltonien 2 ne dépend que de l'électron 2

$$\hat{H}_1 = -\frac{\tilde{h}^2}{2m}\Delta_1 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(2 - \sigma_1)}{r_1}$$

$$\hat{H}_2 = -\frac{\tilde{h}^2}{2m}\Delta_2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(2 - \sigma_1)}{r_2}$$

On a donc :

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\Psi = E\Psi(1,2)$$

Ceci conduit à poser  $\Psi(1,2) = \varphi(1) \varphi(2)$

c'est-à-dire que la fonction d'onde  $\Psi(1,2)$  apparait comme le produit  $\varphi(1)$  d'une fonction qui ne dépend que de l'électron 1 par  $\varphi(2)$  qui ne dépend que de l'électron 2.

En posant pour les énergies  $E = E_1 + E_2$ , on obtient facilement :

$$\tilde{H}_1 \varphi_1 = E_1 \varphi_1 \text{ et } \tilde{H}_2 \varphi_2 = E_2 \varphi_2$$

Nous sommes ramenées à la résolution du problème hydrogénoïde.

D'une façon générale, pour un atome, de numéro atomique  $Z$ , la simplification consiste à dire que le potentiel auquel est soumis chaque électron est de type :

$$-\frac{Z^* e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \text{ avec } Z^* = Z - \sigma$$

$Z^*$  s'appelle la charge nucléaire fictive,  $\sigma$  est la constante d'écran de l'électron.

Cette approximation permet de ramener la résolution (mathématiquement impossible) de l'équation de Schrödinger polyélectronique à la résolution de N (nombre d'électron) équations de Schrödinger monoélectronique de type hydrogénoïde :

Pour l'électron i :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Z^*e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\varphi(i) = E_i\varphi(i) \text{ avec } Z^* = Z - \sigma_i$$

La fonction d'onde s'écrit  $\Psi(1,2,\dots,i,\dots,N) = \varphi(1) \varphi(2) \dots \varphi(i) \dots \varphi(N)$

L'énergie totale est  $E = E_1 + E_2 + \dots + E_i + \dots + E_N$

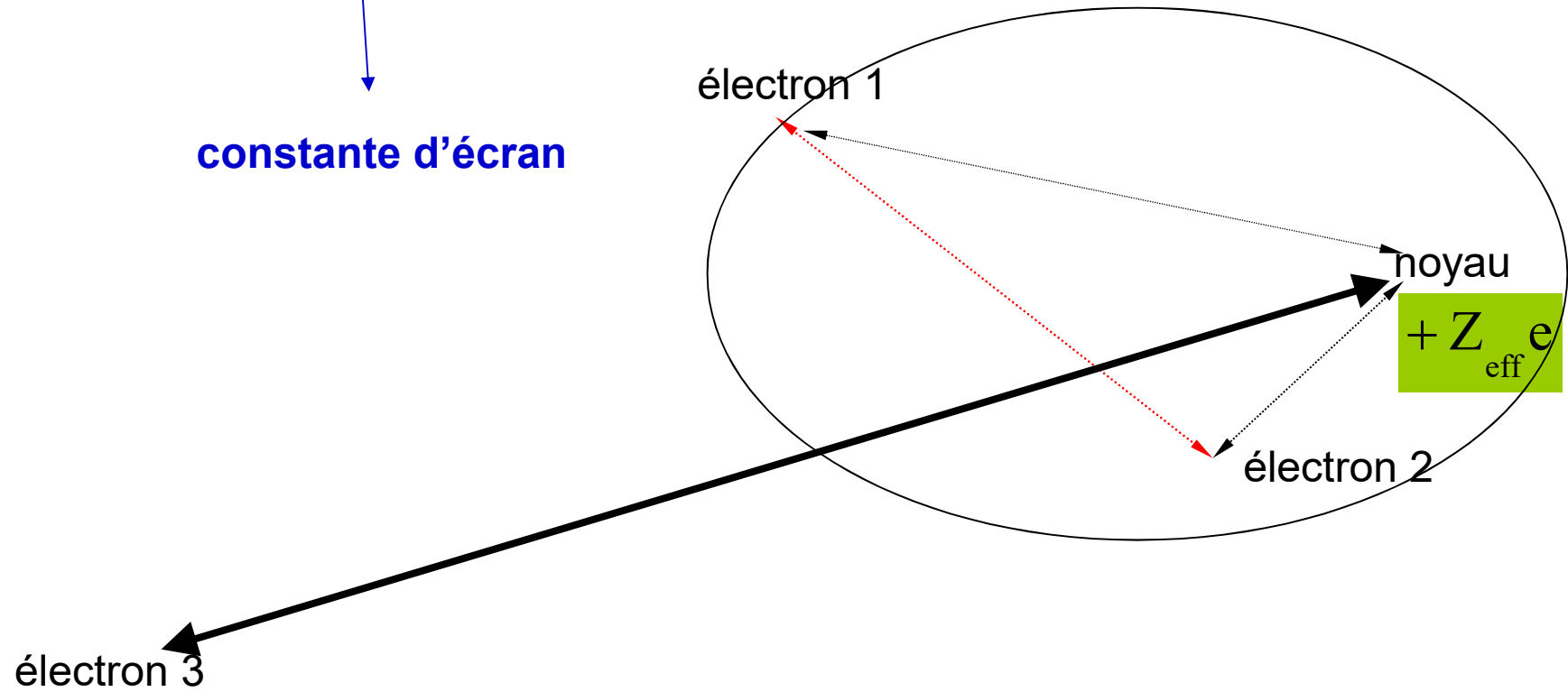
On peut même donner la valeur de l'énergie  $E_i$  du  $i^{\text{eme}}$  électron.

$$E_i = -13,6 \frac{Z_i^{*2}}{n^2} \text{ eV}$$

## Modèle de l'effet d'écran

$$Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$$

constante d'écran



## Modèle de l'effet d'écran

$$Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$$

électron 3 + noyau

$$+ Z_{\text{eff}}$$

||

système **hydrogénoïde**

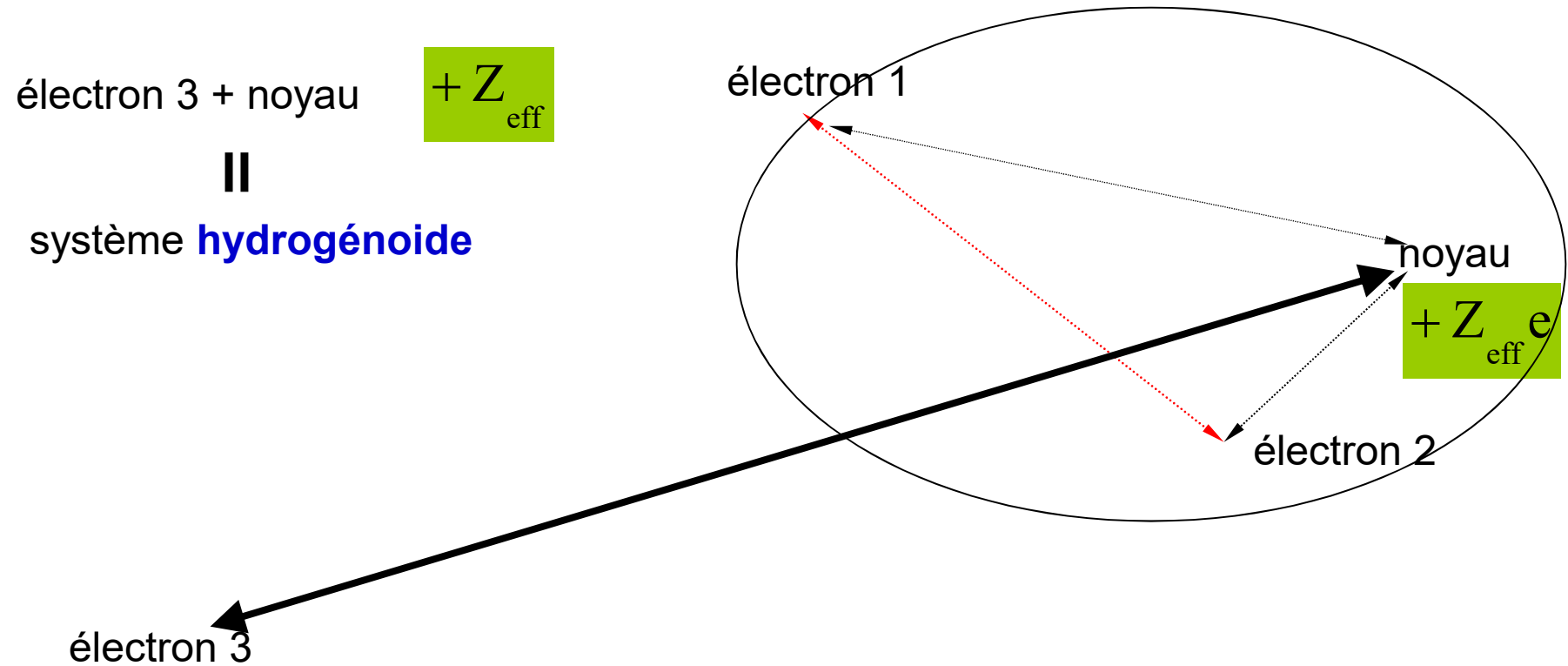
électron 3

électron 1

noyau

$$+ Z_{\text{eff}} e$$

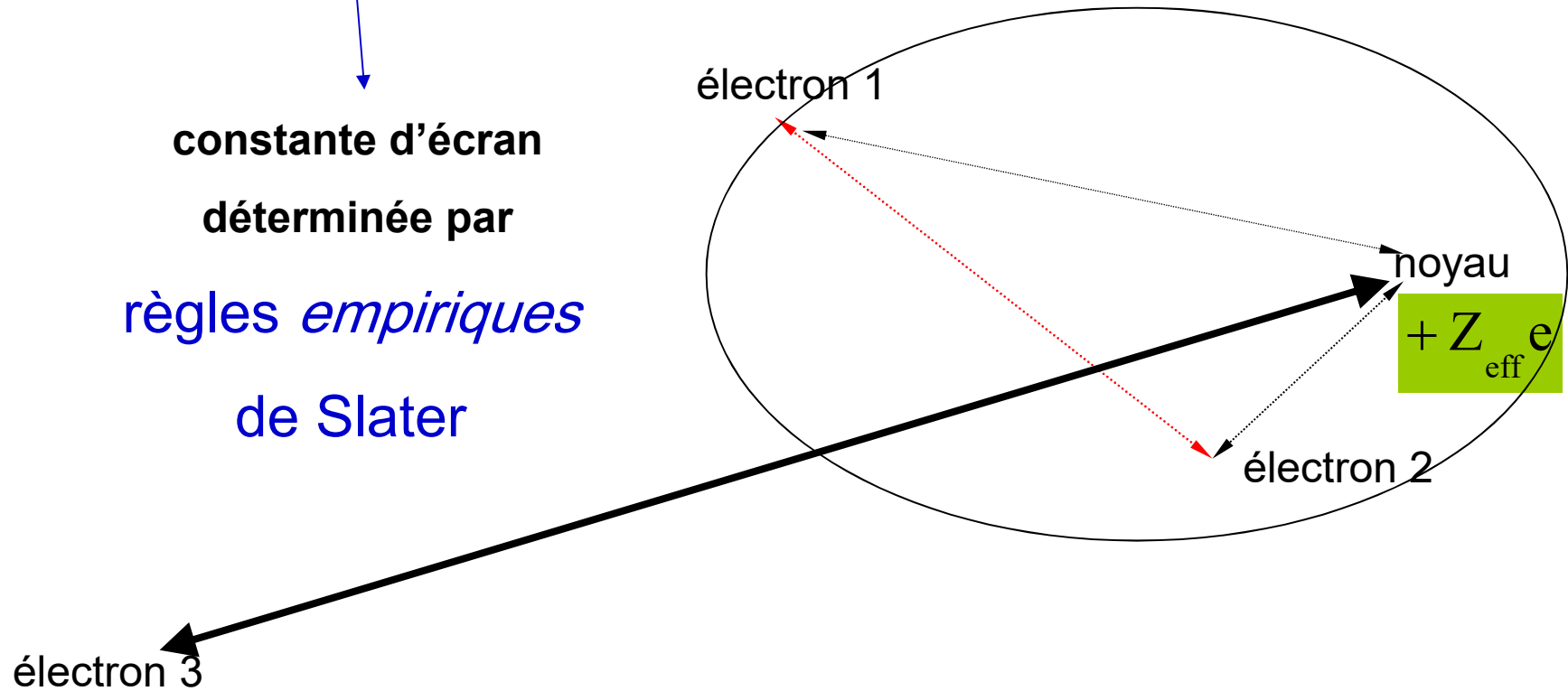
électron 2



## Modèle de l'effet d'écran

$$Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$$

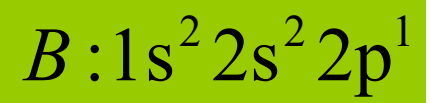
constante d'écran  
déterminée par  
règles *empiriques*  
de Slater





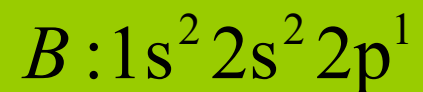
## Constante d'écran

Type d'é	même groupe	groupes n-1	groupes < n-1
(1s)	0,30		
(ns,np)	0,35	0,85	1,00
(nd), (nf)	0,35	1,00	1,00



## Règles de Slater: exemple 1

### Atome de Bore



$\sigma$  vu par électron  $2p$

$$\sigma = 2(0.85) + 2(0.35) = 2.40$$

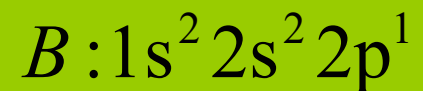
contributions de  $1s^2$

contributions de  $2s^2$

$$Z_{\text{eff}} = Z - \sigma = 5.00 - 2.40 = 1.60$$

## Règles de Slater: exemple 1

### Atome de Bore



$\sigma$  vu par un électron  $1s$

$$\sigma = 1(0.30) + 3(0.00) = 0.30$$

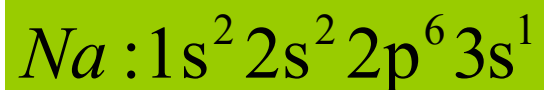
contributions de  $1s^2$

contributions de  $2s^2 2p^1$

$$Z_{\text{eff}} = Z - \sigma = 5.00 - 0.30 = 4.70$$

## Règles de Slater: exemple 2


### Atome de Sodium



$\sigma$  vu par électron **3s**

$$\sigma = 2(1.00) + 8(0.85) = 8.80$$

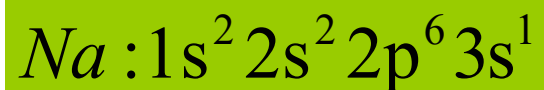
  
contributions de **1s<sup>2</sup>**

  
contributions de **2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>**

$$Z_{\text{eff}} = Z - \sigma = 11.00 - 8.80 = 2.20$$

## Règles de Slater: exemple 2

### Atome de Sodium



$\sigma$  vu par un électron 2p

$$\sigma = 2(0.85) + 7(0.35) = 4.15$$

  
contributions de  $1s^2$

  
contributions de  $2s^2 2p^5$

$$Z_{\text{eff}} = Z - \sigma = 11 - 4.15 = 6.85$$

Le calcul montre que l'énergie ne dépend pas seulement du nombre quantique  $n$  de l'électron envisagé, mais aussi de son nombre quantique secondaire  $l$ .

De sorte que pour tout électron de nombre quantique  $n, l$ , l'énergie est donnée par :

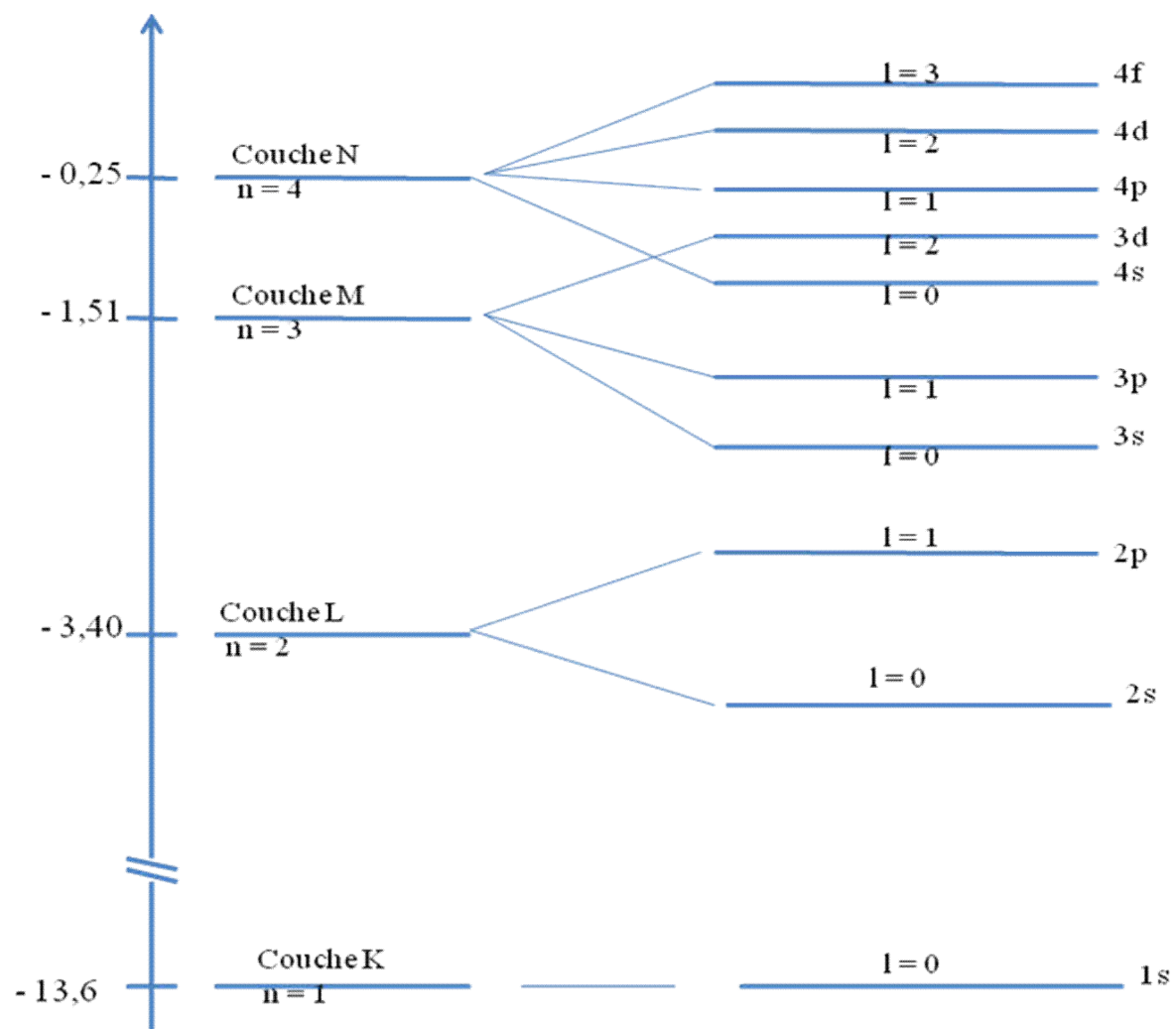
$$E_{n,l} = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}$$

On constate que, par rapport au niveau de l'atome d'hydrogénoïde d'énergie  $E_n = -13,6.Z^2/n^2$ , il apparaît des sous niveau d'énergie  $E_{n,l}$ .

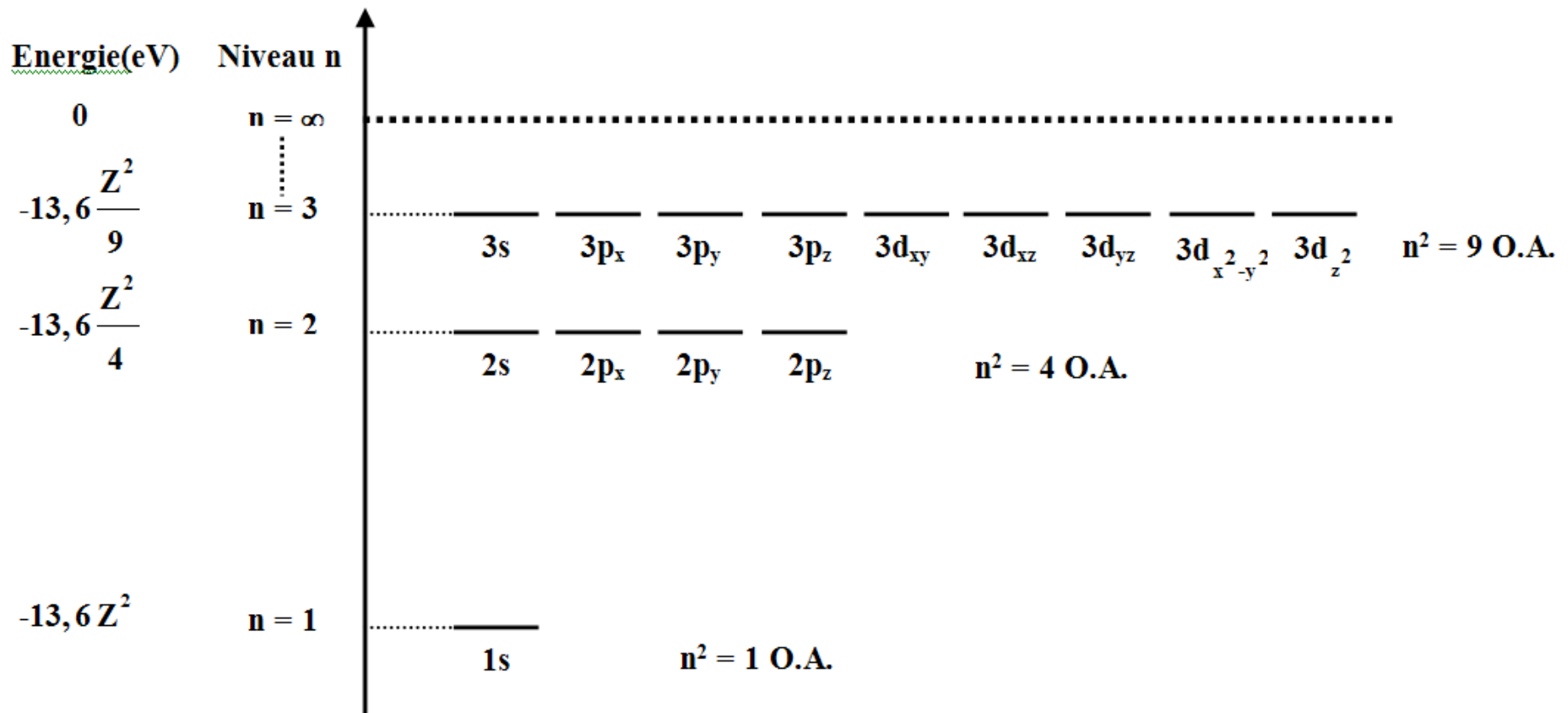
Alors que pour  $n = 2$ , par exemple, on aurait  $n^2 = 4$  état donc 4 O.A. de même énergie. On obtient dans le cas de l'atome à plusieurs électrons 4 O.A. mais dont les énergies sont différentes (sous niveaux) on aura l'O.A. 2s d'une part et les 3 O.A. 2p d'autres part. les 3 O.A. 2p auront même énergie, mais cette énergie sera différente de celle de l'O.A. 2s. On dit que la dégénérescence de l'énergie est partiellement levée.

C'est ainsi que les sous couches d'un même niveau  $n$  de ces atomes auront des énergies différentes, d'où le diagramme énergétique suivant :

## Solution de l'équation : énergie des OA



## Solution de l'équation : énergie des OA





# *Orbitales atomiques*

## Les orbitales atomiques

Les orbitales atomiques sont les solutions de l'équation de Schrödinger

Les orbitales atomiques (OA) dépendent de trois variables

⇒ il est impossible de les représenter en deux dimensions

⇒ nécessité d'effectuer des représentations en coupe

			(n,l,m)	Nom
• n = 1	l = 0	m = 0	(1,0,0)	1s
• n = 2	l = 0	m = 0	(2,0,0)	2s
	l = 1	m = -1	(2,1,-1)	2p <sub>-1</sub>
		m = 0	(2,1,0)	2p <sub>0</sub>
		m = +1	(2,0,+1)	2p <sub>+1</sub>

2p<sub>-1</sub>, 2p<sub>0</sub> et 2p<sub>+1</sub> sont des fonctions **complexes**

Par combinaisons linéaires, on obtient trois OA **réelles** : {2p<sub>x</sub>, 2p<sub>y</sub>, 2p<sub>z</sub>}

## Les orbitales atomiques

Les orbitales atomiques sont les solutions de l'équation de Schrödinger

Les orbitales atomiques (OA) dépendent de trois variables

⇒ il est impossible de les représenter en deux dimensions

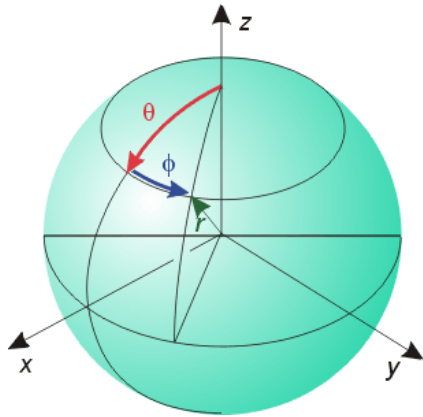
⇒ nécessité d'effectuer des représentations en coupe

			(n,l,m)	Nom
• n = 1	l = 0	m = 0	(1,0,0)	1s
• n = 2	l = 0	m = 0	(2,0,0)	2s
	l = 1	m = -1	(2,1,-1)	2p <sub>-1</sub>
		m = 0	(2,1,0)	2p <sub>0</sub>
		m = +1	(2,0,+1)	2p <sub>+1</sub>

Les 5 orbitales de type d ( $n \geq 3$  ;  $l = 2$  ;  $m = -2, -1, 0, +1, +2$ ) subissent le même traitement, et sont notées sous les labels  $d_{z^2}$ ,  $d_{x^2-y^2}$ ,  $d_{xy}$ ,  $d_{yz}$  et  $d_{xz}$

## Organisation du nuage électronique en couches, sous couches et orbitales atomiques

n (couche)	l (sous-couche)	m	Notation	Cases quantiques
1 (K)	0 (s)	0	1s	<div style="display: flex; align-items: center; justify-content: center;"> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px; margin-right: 10px;"></div> 1s </div>
2 (L)	0 (s)	0	2s	<div style="display: flex; align-items: center; justify-content: center;"> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px; margin-right: 10px;"></div> <div style="display: flex; gap: 5px;"> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> </div> <div style="margin-left: 10px;"> 2s      2p </div> </div>
	1 (p)	-1	3p <sub>x</sub>	
		0	2p <sub>y</sub>	
		1	2p <sub>z</sub>	
3 (M)	0 (s)	0	3s	<div style="display: flex; align-items: center; justify-content: center;"> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px; margin-right: 10px;"></div> <div style="display: flex; gap: 5px;"> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> </div> <div style="margin-left: 10px;"> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> <div style="border: 1px solid black; width: 20px; height: 20px;"></div> </div> <div style="margin-left: 10px;"> 3s      3p                  3d </div> </div>
	1 (p)	-1	2p <sub>x</sub>	
		0	2p <sub>y</sub>	
		1	2p <sub>z</sub>	
	2 (d)	-2	3d <sub>xy</sub>	
		-1	3d <sub>yz</sub>	
		0	3d <sub>zx</sub>	
		1	3d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>	
		2	3d <sub>z<sup>2</sup></sub>	



$$\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

La condition  $\iiint_{\text{espace}} |\Psi|^2 \cdot d\tau = 1$  impose que :

$$\int_{r=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\Pi} \int_{\varphi=0}^{2\Pi} R_{n,l}^2(r) \cdot Y_{l,m}^2(\theta,\varphi) \cdot r^2 \cdot \sin\theta \cdot dr \cdot d\theta \cdot d\varphi = 1$$

donc

$$\int_{r=0}^{\infty} R_{n,l}^2(r) \cdot r^2 \cdot dr \cdot \int_{\theta=0}^{\Pi} \int_{\varphi=0}^{2\Pi} Y_{l,m}^2(\theta,\varphi) \cdot \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\varphi = 1$$

Soit encore :

$$\int_{r=0}^{\infty} R_{n,l}^2(r) \cdot r^2 \cdot dr = 1$$

$$\int_{\theta=0}^{\Pi} \int_{\varphi=0}^{2\Pi} Y_{l,m}^2(\theta,\varphi) \cdot \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\varphi = 1$$

# Etude de la partie radiale

## Notion de densité de probabilité radiale

$$\iiint_{\text{espace}} |\Psi|^2 . d\tau = 1$$

$|\Psi|^2$  : **densité de probabilité  
de présence** de l'électron

$$dP = |\Psi|^2 . d\tau$$

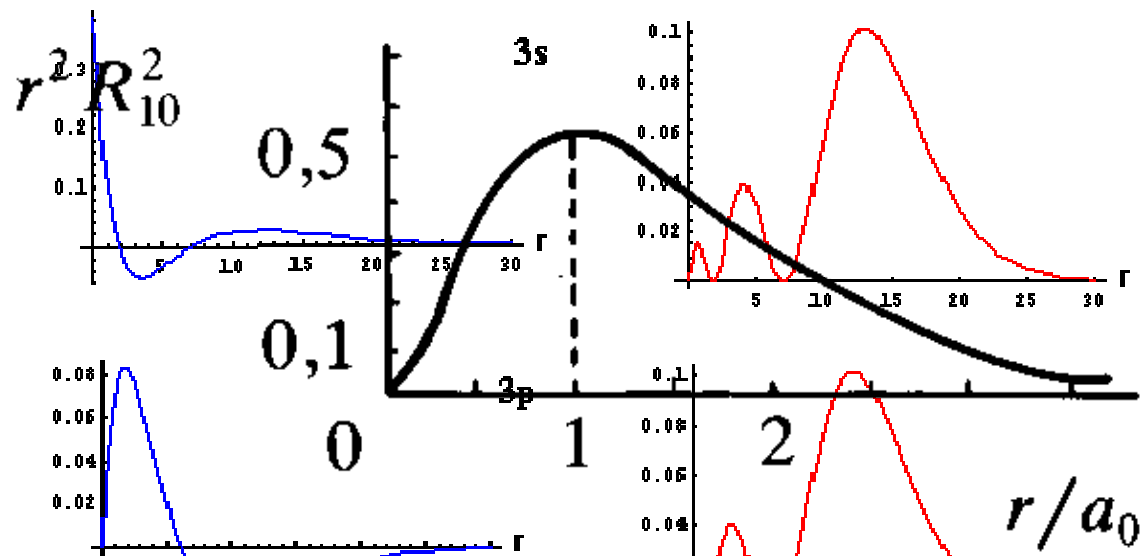
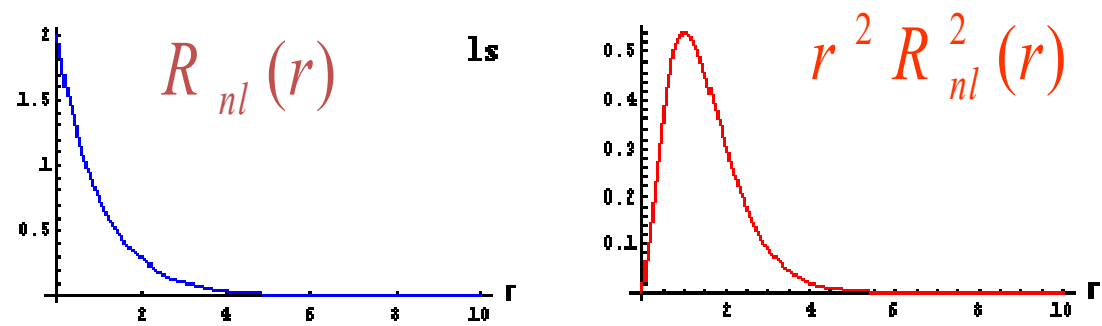
$$\frac{dP}{d\tau} = |\Psi|^2 \quad \text{densité de probabilité  
de présence de l'électron}$$

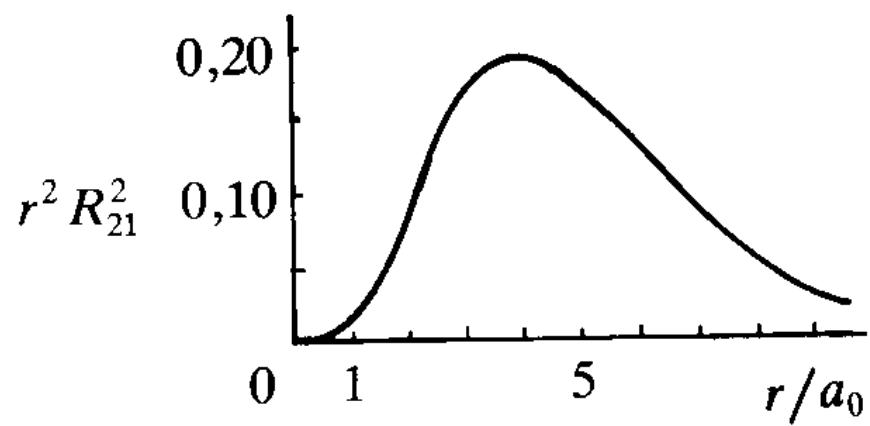
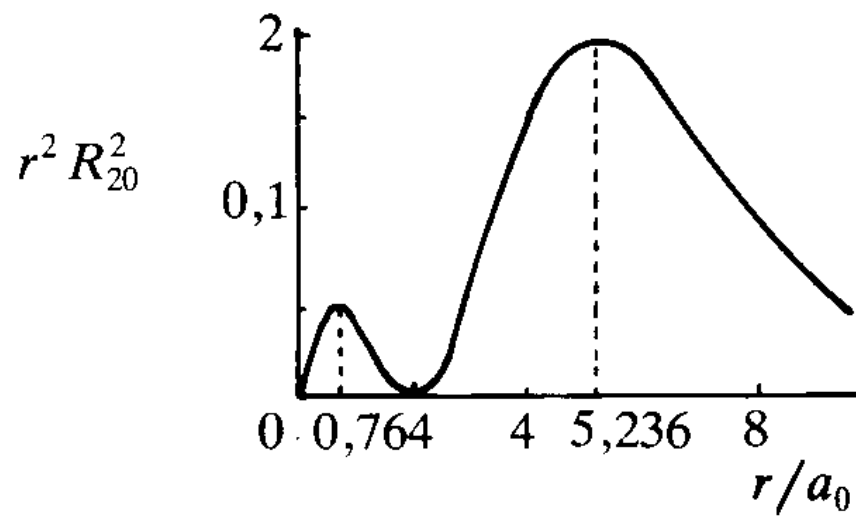
$$\int_{r=0}^{\infty} R_{n,l}^2(r) . r^2 . dr = 1$$

$R_{n,l}^2(r) . r^2$  **densité de probabilité  
de présence radiale**  
de l'électron

$$dP_r = R_{n,l}^2(r) . r^2 . dr$$

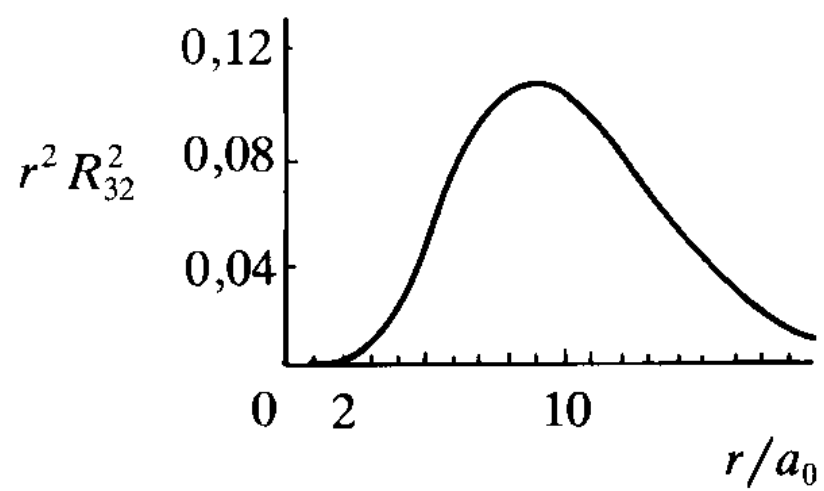
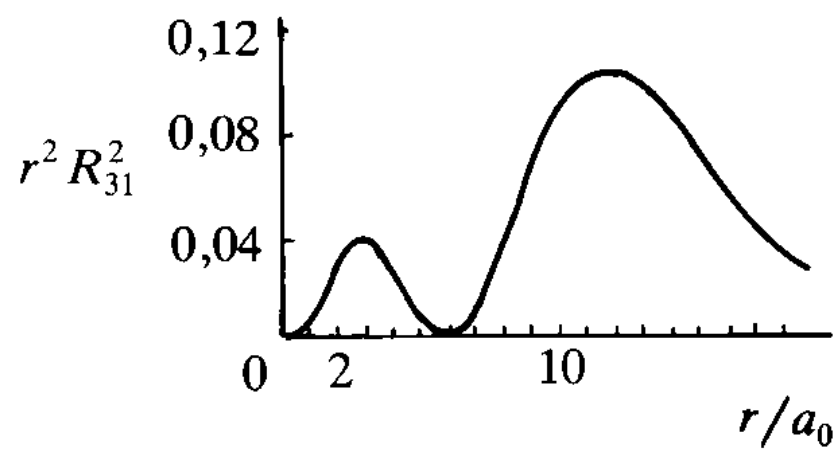
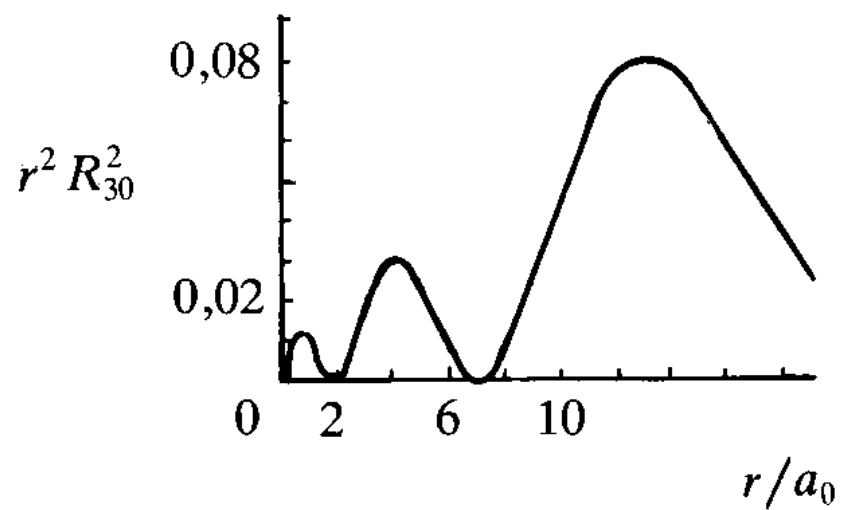
$$\frac{dP_r}{dr} = R_{n,l}^2(r) . r^2 \quad \text{densité de probabilité  
de présence radiale  
de l'électron}$$





**n = 2**





**n = 3**

## Etude de la partie radiale

**Maximum pour la densité de probabilité radiale**

$$\frac{dP_r}{dr} = R_{n,l}^2(r).r^2$$

$$n = 1 : r = a_0$$

$$n = 2 : r \approx 5 a_0$$

$$n = 3 : r \approx 11 a_0$$

**Définition :** le **rayon d'une fonction propre** est le rayon de maximum de densité de probabilité de présence radiale

Le rayon d'une fonction propre  
croît avec  $n$   
dépend peu de  $l$

Plus les électrons sont sur une couche élevée, plus ils sont loins du noyau

## Etude de la partie angulaire

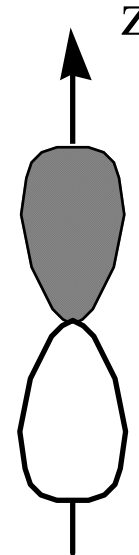
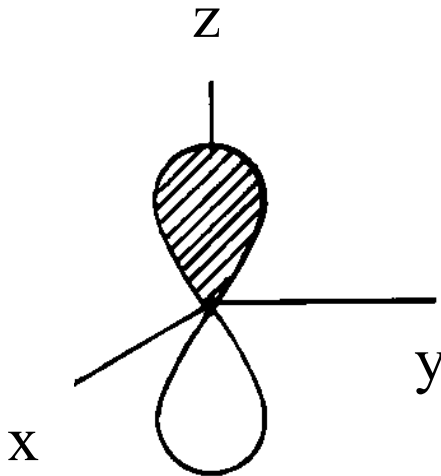
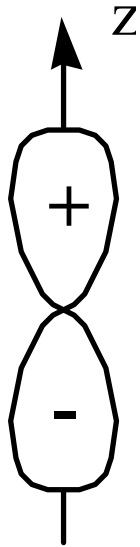
La partie **radiale**  $R(r)$  de la fonction propre permettait de visualiser "**l'extension**" du nuage électronique.

La partie **angulaire** permet de donner une idée des directions privilégiées pour la densité électronique

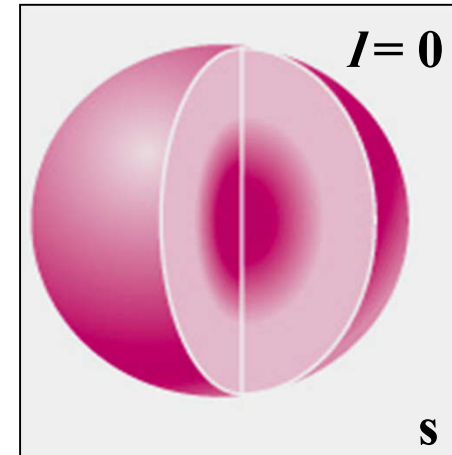
- $Y_{l,m}$  ne dépend pas de  $n \Rightarrow$  résultats trouvés valables pour tout  $n$ .
- $Y_{l,m} = Y_{l,m}(\theta, \varphi) \Rightarrow$  nécessité de tracer des fonction en coupe.

## Représentation d'une orbitale

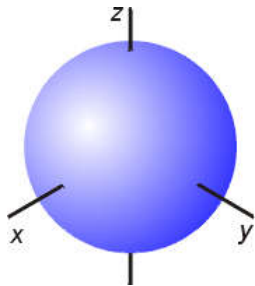
- ✓ On schématise la forme d'une courbe d'isodensité électronique
- ✓ On affecte aux lobes dessinés les signes de la partie angulaire correspondante.



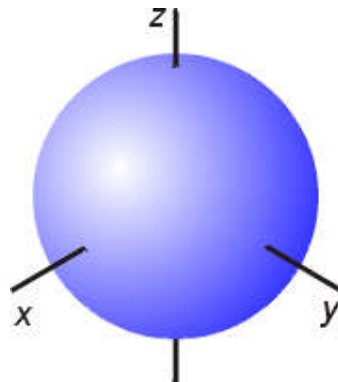
## Représentation des orbitales s



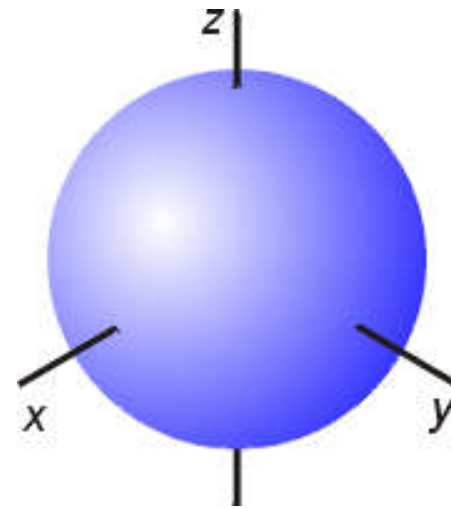
$n = 1$



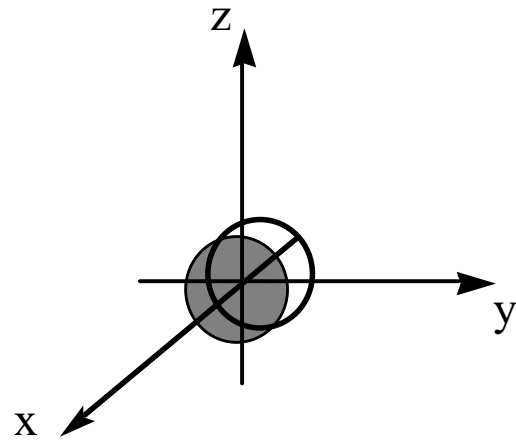
$n = 2$



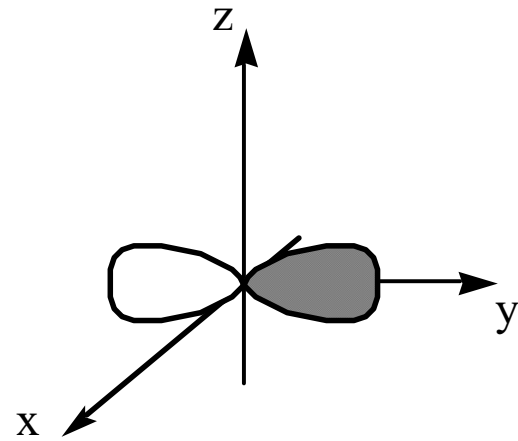
$n = 3$



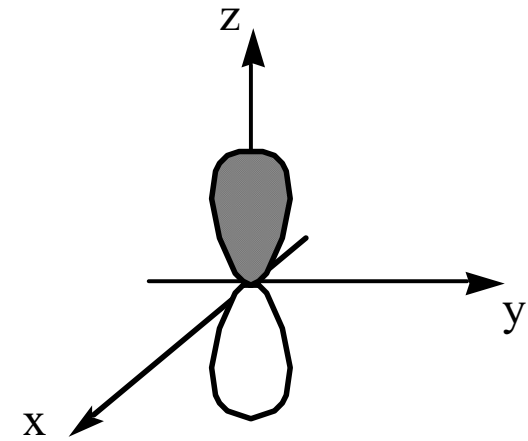
## Représentation des orbitales p



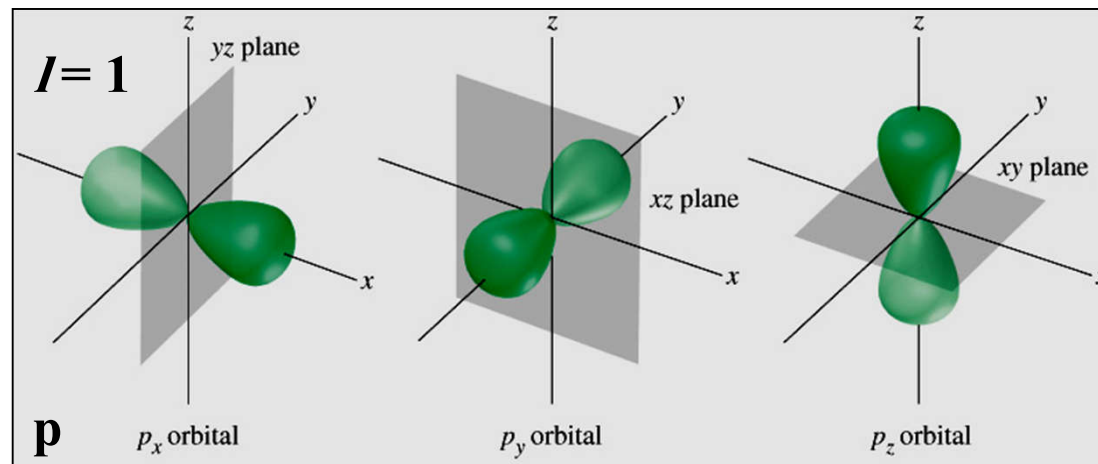
orbitale  $p_x$



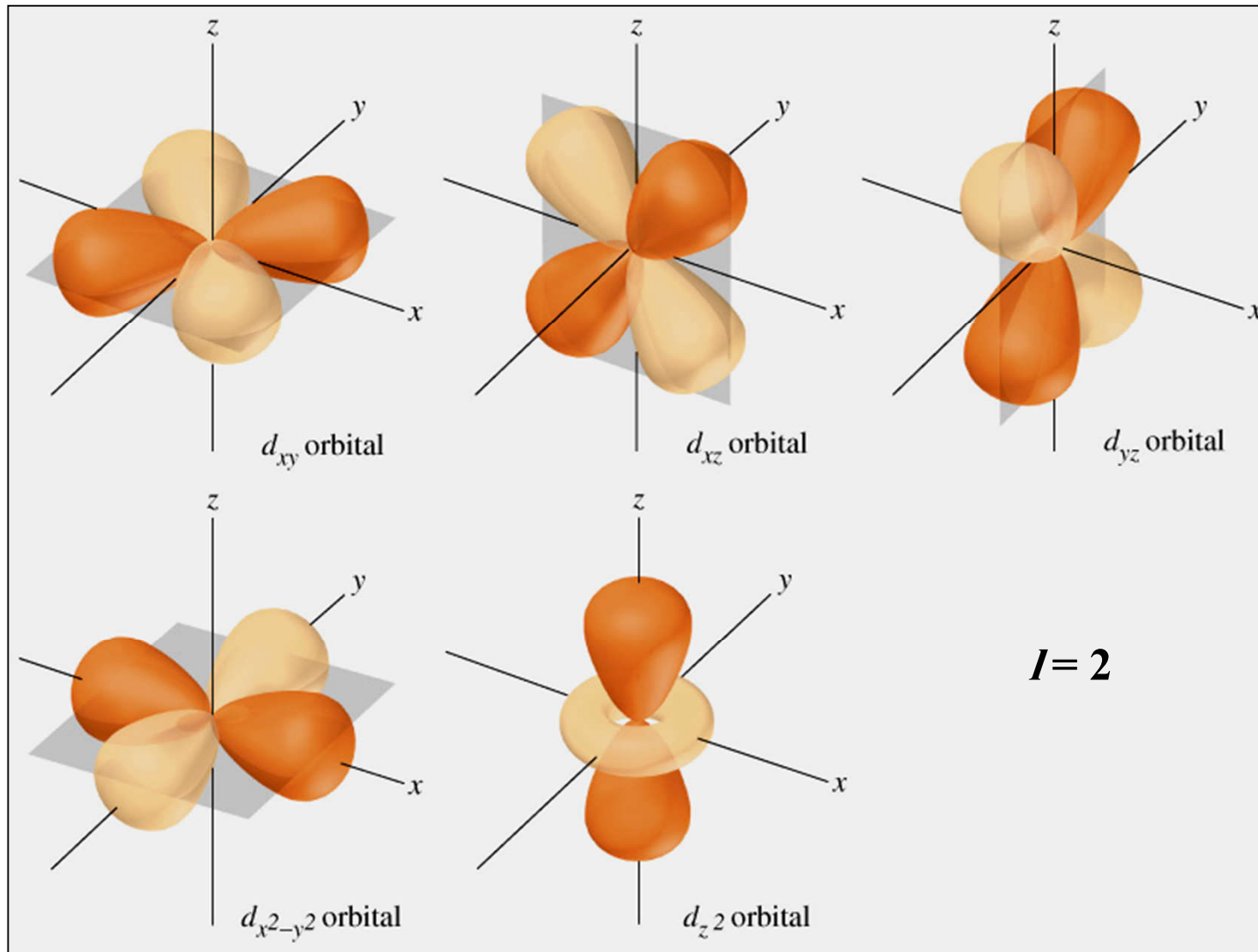
orbitale  $p_y$



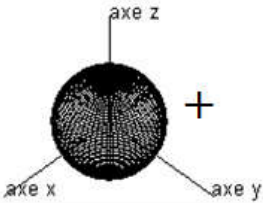
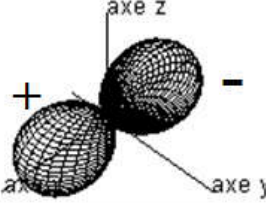
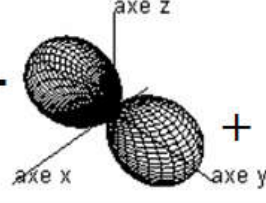
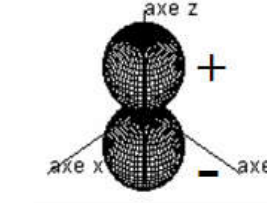
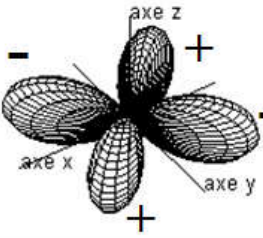
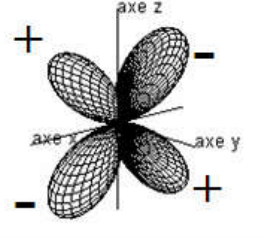
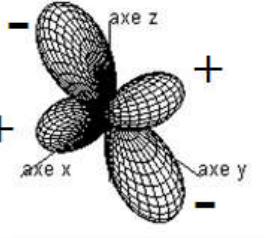
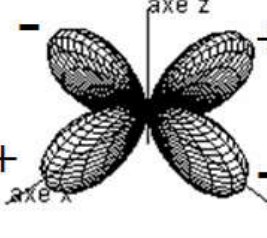
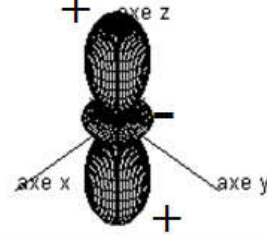
orbitale  $p_z$



## Représentation des orbitales d















































## *Solution de l'équation : forme et symétrie des premières OA*

					
<b>Symétrie</b>	<b>s : sphérique</b>	<b>p<sub>x</sub> : axiale (axe x)</b>	<b>p<sub>y</sub> : axiale (axe y)</b>	<b>p<sub>z</sub> : axiale (axe z)</b>	
					
<b>Symétrie</b>	<b>d<sub>xy</sub> : plane (plan xy)</b>	<b>d<sub>xz</sub> : plane (plan xz)</b>	<b>d<sub>yz</sub> : plane (plan yz)</b>	<b>d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> : plane (plan xy)</b>	<b>d<sub>z<sup>2</sup></sub> : axiale (axe z)</b>



## *Solution de l'équation : forme et symétrie d'autres OA*

	$s (l=0)$	$p (l=1)$	$d (l=2)$	$f (l=3)$
$n=1$	 $m=0$			
$n=2$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$		
$n=3$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$	
$n=4$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$	 $m=-3$  $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$  $m=3$
$n=5$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	 $m=-2$  $m=-1$  $m=0$  $m=1$  $m=2$	...
$n=6$	 $m=0$	 $m=-1$  $m=0$  $m=1$	...	...
$n=7$	 $m=0$	...	...	...

## Exercice d'apprentissage n°2

Donner les désignations des orbitales atomiques qui correspondent aux électrons caractérisés par les ensembles suivants de nombres quantiques.

a)  $n=3$  ;  $l=0$ ,  $m_l=0$ ;  $m_s=+1/2$ .

b)  $n=4$  ;  $l=2$ ;  $m_l=2$ ;  $m_s=-1/2$ .

## Exercice d'application n°1

Soit les quatre électrons (A,B,C,D) d'un même atome dans son état fondamental caractérisés par les nombres quantiques ci-après:

Électron A:  $n=4$ ;  $l=1$ ;  $m_l=0$ ;  $m_s=+1/2$

B:  $n=3$ ;  $l=2$ ;  $m_l=+1$ ;  $m_s=+1/2$

C:  $n=3$ ;  $l=0$ ;  $m_l=-1$ ;  $m_s=-1/2$

D:  $n=2$ ;  $l=2$ ;  $m_l=+1$ ;  $m_s=+1/2$

*Préciser pour chaque électron le nom de l'orbitale atomique qui l'abrite. Laquelle (lesquelles) des combinaisons des nombres quantiques n'est (ne sont) pas permises?*

## *Solution de l'équation : Les premières orbitales atomiques (OA)*

Rappel :  $n=1,2,3\dots$  ;  $l=0,\dots,n-1$  ;  $m = -l,\dots,-1,0,1,\dots,l$

$$E_n = -\frac{E_0 Z^2}{n^2}$$

n	l	m	notation	énergie
1	0	0	1s	$-E_0 Z^2$
2	0	0	2s	$-E_0 Z^2/4$
	1	-1	2p <sub>x</sub>	
4 OA de même énergie		0	2p <sub>z</sub>	
(4 OA dégénérées)		1	2p <sub>y</sub>	
3	0	0	3s	$-E_0 Z^2/9$
	1	-1	3p <sub>x</sub>	
9 OA de même énergie		0	3p <sub>z</sub>	
(9 OA dégénérées)		1	3p <sub>y</sub>	
	2	-2	3d <sub>xy</sub>	
		-1	3d <sub>yz</sub>	
		0	3d <sub>z<sup>2</sup></sub>	
		1	3d <sub>xz</sub>	
		2	3d <sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>	

# *Configuration électronique des atomes*

# Règles d'écriture de la configuration électronique des atomes/des ions monoatomiques

L'écriture de la configuration électronique d'un atome est fondée sur un ensemble de règles et notation

## Principe d'exclusion de Pauli

Dans un atome, deux électrons ne peuvent avoir les quatre nombres quantiques identiques.

La conséquence pratique de ce principe est qu'une OA, définie par (n,l,m), ne peut accueillir au maximum que deux électrons de spins opposés.

### Exemples :

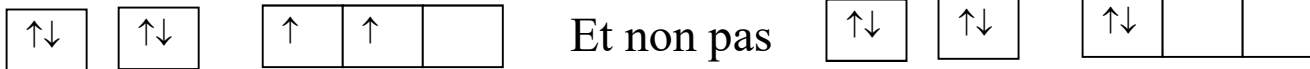
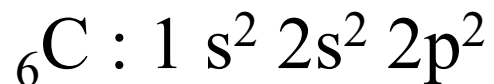
${}_1\text{H} : 1s^1$   $\boxed{\uparrow}$  un électron célibataire

${}_2\text{He} : 1s^2$   $\boxed{\uparrow\downarrow}$  deux électrons appariés (doublet d'électrons)

Une couche électronique de rang n comprend  **$n^2$  orbitales atomiques** et contient au maximum  **$2n^2$  électrons**. Ainsi, la capacité d'accueil maximale des sous couches ns, np, nd et nf est **de 2, 6, 10 et 14** électrons, respectivement.

## Règle de Hund ou de la multiplicité maximale

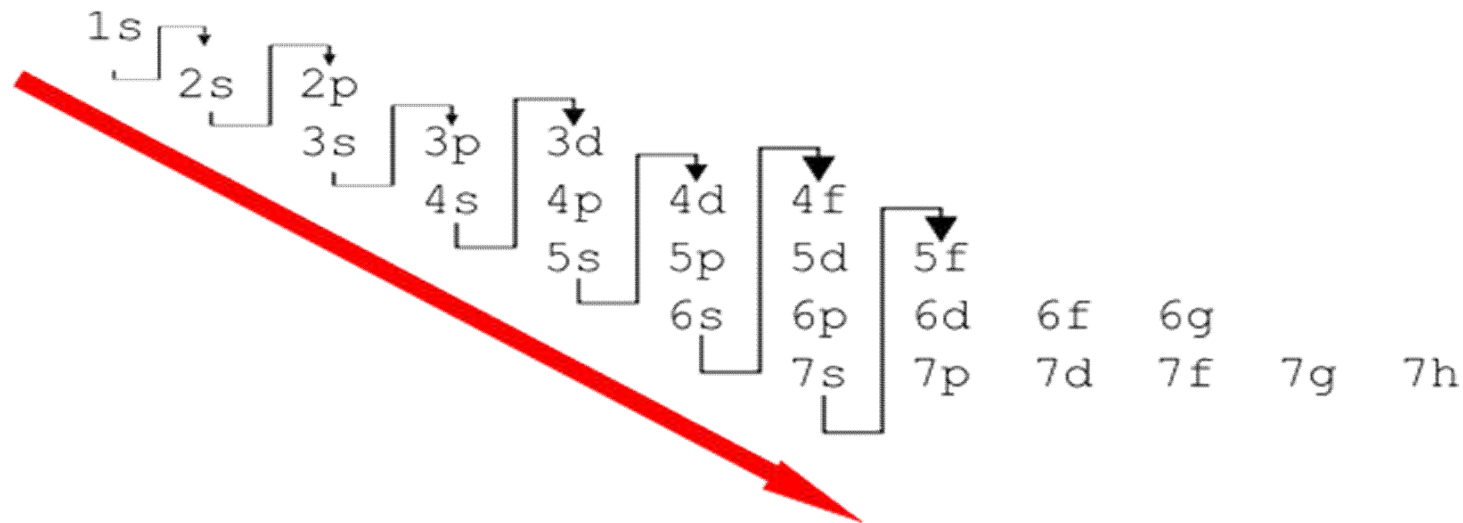
La règle de Hund préconise que si le nombre d'électrons est insuffisant pour remplir entièrement les orbitales atomiques d'une même sous couche, on procède comme suit: on occupe d'abord un nombre maximum d'orbitales vides par un électron de spin  $+1/2$ . Par la suite, dans la mesure des électrons restants disponibles, on ajoute dans chaque orbitale un second électron de spin opposé.



## Règle de Klechkowsky

Pour que l'atome ait une énergie minimale (état fondamental), le remplissage des couches et des sous couches électroniques doit se faire dans l'ordre croissant de  $(n+l)$ . Si cette valeur est la même pour plusieurs sous couches, celle qui a la plus petite valeur du nombre quantique principal ( $n$ ) est remplie en premier lieu.

On retrouve l'ordre des énergies en se déplaçant en diagonale et en commençant par la 1s



## Exercice d'apprentissage n°3

a) Quelle est, parmi les possibilités ci-dessous, celle qui correspond à deux électrons dans une orbitale atomique de niveau  $n=3$ ?

$l$	$m_l$	$m_s$
3	-3	+1/2 et -1/2
0	0	+1/2
1	+1	+1/2 et -1/2
2	-1	+1/2 ou -1/2
1	+2	+1/2 et -1/2

b) Ecrire :

b.1- La configuration électronique de l'atome de soufre dans son état fondamental

b.2- La configuration électronique de l'atome de soufre dans son premier état excité.



## Électrons de valence :

sont les électrons de la couche de plus grand  $n$  + les électrons de la dernière sous-couche non pleine. Les autres sont les électrons de cœur : ils ne participent pas à la réactivité chimique de l'atome

**Certaines configurations électroniques de valence sont plus stables** et conduisent à des anomalies de remplissage / règles énoncées: il s'agit de configurations présentant dans leur couche de valence une sous-couche pleine ou demi-pleine ( sauf s )

### Conséquences :

Cr(24) :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^4$  est en réalité  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^5$

Cu(29) :  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^9$  est en réalité  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$

Les propriétés périodiques comme l'énergie d'ionisation ou d'attachement électronique sont modulées par ces stabilités particulières de configuration :

O (  $2s^2 2p^4$  )  $\rightarrow$  O<sup>+</sup> (  $2s^2 2p^3$  ) est plus facile que prévu ( crée une configuration plus stable ) , mais

N (  $2s^2 2p^3$  )  $\rightarrow$  N<sup>+</sup> (  $2s^2 2p^2$  ) est plus difficile que prévu ( détruit une configuration plus stable ) .... etc...

# **Classification périodique des éléments**

# **I- Tableau périodique des éléments**

## La classification périodique des éléments repose sur trois règles principales :

- Les éléments sont **rangés en lignes** (périodes) par ordre croissant de numéro atomique
- On passe à la **ligne suivante** à chaque fois que le remplissage d'une **nouvelle couche électronique commence**. Il y a sept périodes au total ( $n=1 ; 2 ; 3 ; 4 ; 5 ; 6 ; 7$ ).
- Les éléments de **même configuration électronique externe** sont placés les uns en dessous des autres selon des colonnes et constituent des **groupes ou familles** : on a 18 groupes au total.

		Group**																	
Pe ri od																	18		
	1																vIII	A	
	1A																8A		
1	1 <u>H</u> 1.008	2 IIA 2A											13 IIIA 3A	14 IVA 4A	15 VA 5A	16 VIA 6A	17 VIIA 7A	2 <u>He</u> 4.003	
2	3 <u>Li</u> 6.941	4 <u>Be</u> 9.012											5 <u>B</u> 10.81	6 <u>C</u> 12.01	7 <u>N</u> 14.01	8 <u>O</u> 16.00	9 <u>F</u> 19.00	10 <u>Ne</u> 20.18	
3	11 <u>Na</u> 22.99	12 <u>Mg</u> 24.31	3 IIIB 3B	4 IVB 4B	5 VB 5B	6 VIB 6B	7 VIIB 7B	8 ----- VIII ----- 8	9 ----- VIII ----- 8	10 ----- VIII ----- 8	11 IB 1B	12 IIB 2B	13 <u>Al</u> 26.98	14 <u>Si</u> 28.09	15 <u>P</u> 30.97	16 <u>S</u> 32.07	17 <u>Cl</u> 35.45	18 <u>Ar</u> 39.95	
4	19 <u>K</u> 39.10	20 <u>Ca</u> 40.08	21 <u>Sc</u> 44.96	22 <u>Ti</u> 47.88	23 <u>V</u> 50.94	24 <u>Cr</u> 52.00	25 <u>Mn</u> 54.94	26 <u>Fe</u> 55.85	27 <u>Co</u> 58.47	28 <u>Ni</u> 58.69	29 <u>Cu</u> 63.55	30 <u>Zn</u> 65.39	31 <u>Ga</u> 69.72	32 <u>Ge</u> 72.59	33 <u>As</u> 74.92	34 <u>Se</u> 78.96	35 <u>Br</u> 79.90	36 <u>Kr</u> 83.80	
5	37 <u>Rb</u> 85.47	38 <u>Sr</u> 87.62	39 <u>Y</u> 88.91	40 <u>Zr</u> 91.22	41 <u>Nb</u> 92.91	42 <u>Mo</u> 95.94	43 <u>Tc</u> (98)	44 <u>Ru</u> 101.1	45 <u>Rh</u> 102.9	46 <u>Pd</u> 106.4	47 <u>Ag</u> 107.9	48 <u>Cd</u> 112.4	49 <u>In</u> 114.8	50 <u>Sn</u> 118.7	51 <u>Sb</u> 121.8	52 <u>Te</u> 127.6	53 <u>I</u> 126.9	54 <u>Xe</u> 131.3	
6	55 <u>Cs</u> 132.9	56 <u>Ba</u> 137.3	57 <u>La*</u> 138.9	72 <u>Hf</u> 178.5	73 <u>Ta</u> 180.9	74 <u>W</u> 183.9	75 <u>Re</u> 186.2	76 <u>Os</u> 190.2	77 <u>Ir</u> 190.2	78 <u>Pt</u> 195.1	79 <u>Au</u> 197.0	80 <u>Hg</u> 200.5	81 <u>Tl</u> 204.4	82 <u>Pb</u> 207.2	83 <u>Bi</u> 209.0	84 <u>Po</u> (210)	85 <u>At</u> (210)	86 <u>Rn</u> (222)	
7	87 <u>Fr</u> (223)	88 <u>Ra</u> (226)	89 <u>Ac</u> ~ (227)	104 <u>Rf</u> (257)	105 <u>Db</u> (260)	106 <u>Sg</u> (263)	107 <u>Bh</u> (262)	108 <u>Hs</u> (265)	109 <u>Mt</u> (266)	110 --- 0	111 --- 0	112 --- 0		114 --- 0		116 --- 0		118 --- 0	

Lanthanide Series*	58 <u>Ce</u> 140.1	59 <u>Pr</u> 140.9	60 <u>Nd</u> 144.2	61 <u>Pm</u> (147)	62 <u>Sm</u> 150.4	63 <u>Eu</u> 152.0	64 <u>Gd</u> 157.3	65 <u>Tb</u> 158.9	66 <u>Dy</u> 162.5	67 <u>Ho</u> 164.9	68 <u>Er</u> 167.3	69 <u>Tm</u> 168.9	70 <u>Yb</u> 173.0	71 <u>Lu</u> 175.0
Actinide Series~	90 <u>Th</u> 232.0	91 <u>Pa</u> (231)	92 <u>U</u> (238)	93 <u>Np</u> (237)	94 <u>Pu</u> (242)	95 <u>Am</u> (243)	96 <u>Cm</u> (247)	97 <u>Bk</u> (247)	98 <u>Cf</u> (249)	99 <u>Es</u> (254)	100 <u>Fm</u> (253)	101 <u>Md</u> (256)	102 <u>No</u> (254)	103 <u>Lr</u> (257)

Group\*\*

Period

Il est possible de regrouper les éléments en blocs, suivant le type de sous couche de valence s,p,d ou f

row	1																					18
	IA																					vIII A 8A
1	1 <u>H</u> 1.008	2 IIA 2A											13 IIIA 3A	14 IVA 4A	15 VA 5A	16 VIA 6A	17 VIIA 7A	2 <u>He</u> 4.003				
2	3 <u>Li</u> 6.941	4 <u>Be</u> 9.012											5 <u>B</u> 10.81	6 <u>C</u> 12.01	7 <u>N</u> 14.01	8 <u>O</u> 16.00	9 <u>F</u> 19.00	10 <u>Ne</u> 20.18				
3	11 <u>Na</u> 22.99	12 <u>Mg</u> 24.31	3 IIIB 3B	4 IVB 4B	5 VB 5B	6 VIB 6B	7 VIIB 7B	8 ----- VIII ----- ----- 8 -----	9	10	11 IB 1B	12 IIB 2B	13 <u>Al</u> 26.98	14 <u>Si</u> 28.09	15 <u>P</u> 30.97	16 <u>S</u> 32.07	17 <u>Cl</u> 35.45	18 <u>Ar</u> 39.95				
4	19 <u>K</u> 39.10	20 <u>Ca</u> 40.08	21 <u>Sc</u> 44.96	22 <u>Ti</u> 47.88	23 <u>V</u> 50.94	24 <u>Cr</u> 52.00	25 <u>Mn</u> 54.94	26 <u>Fe</u> 55.85	27 <u>Co</u> 58.47	28 <u>Ni</u> 58.69	29 <u>Cu</u> 63.55	30 <u>Zn</u> 65.39	31 <u>Ga</u> 69.72	32 <u>Ge</u> 72.59	33 <u>As</u> 74.92	34 <u>Se</u> 78.96	35 <u>Br</u> 79.90	36 <u>Kr</u> 83.80				
5	37 <u>Rb</u> 85.47	38 <u>Sr</u> 87.62	39 <u>Y</u> 88.91	40 <u>Zr</u> 91.22	41 <u>Nb</u> 92.91	42 <u>Mo</u> 95.94	43 <u>Tc</u> (98)	44 <u>Ru</u> 101.1	45 <u>Rh</u> 102.9	46 <u>Pd</u> 106.4	47 <u>Ag</u> 107.9	48 <u>Cd</u> 112.4	49 <u>In</u> 114.8	50 <u>Sn</u> 118.7	51 <u>Sb</u> 121.8	52 <u>Te</u> 127.6	53 <u>I</u> 126.9	54 <u>Xe</u> 131.3				
6	55 <u>Cs</u> 132.9	56 <u>Ba</u> 137.3	57 <u>La*</u> 138.9	72 <u>Hf</u> 178.5	73 <u>Ta</u> 180.9	74 <u>W</u> 183.9	75 <u>Re</u> 186.2	76 <u>Os</u> 190.2	77 <u>Ir</u> 190.2	78 <u>Pt</u> 195.1	79 <u>Au</u> 197.0	80 <u>Hg</u> 200.5	81 <u>Tl</u> 204.4	82 <u>Pb</u> 207.2	83 <u>Bi</u> 209.0	84 <u>Po</u> (210)	85 <u>At</u> (210)	86 <u>Rn</u> (222)				
7	87 <u>Fr</u> (223)	88 <u>Ra</u> (226)	89 <u>Ac</u> ~ (227)	104 <u>Rf</u> (257)	105 <u>Db</u> (260)	106 <u>Sg</u> (263)	107 <u>Bh</u> (262)	108 <u>Hs</u> (265)	109 <u>Mt</u> (266)	110 --- 0	111 --- 0	112 ---		114 ---		116 ---		118 ---				

Lanthanide Series\*

58 <u>Ce</u> 140.1	59 <u>Pr</u> 140.9	60 <u>Nd</u> 144.2	61 <u>Pm</u> (147)	62 <u>Sm</u> 150.4	63 <u>Eu</u> 152.0	64 <u>Gd</u> 157.3	65 <u>Tb</u> 158.9	66 <u>Dy</u> 162.5	67 <u>Ho</u> 164.9	68 <u>Er</u> 167.3	69 <u>Tm</u> 168.9	70 <u>Yb</u> 173.0	71 <u>Lu</u> 175.0
90 <u>Th</u> 232.0	91 <u>Pa</u> (231)	92 <u>U</u> (238)	93 <u>Np</u> (237)	94 <u>Pu</u> (242)	95 <u>Am</u> (243)	96 <u>Cm</u> (247)	97 <u>Bk</u> (247)	98 <u>Cf</u> (249)	99 <u>Es</u> (254)	100 <u>Fm</u> (253)	101 <u>Md</u> (256)	102 <u>No</u> (254)	103 <u>Lr</u> (257)

Actinide Series~

Group\*\*

Period	1	2
1	<u>H</u> 1.008	
2	<u>Li</u> 6.941	<u>Be</u> 9.012
3	<u>Na</u> 22.99	<u>Mg</u> 24.31
4	<u>K</u> 39.10	<u>Ca</u> 40.08
5	<u>Rb</u> 85.47	<u>Sr</u> 87.62
6	<u>Cs</u> 132.9	<u>Ba</u> 137.3
7	<u>Fr</u> (223)	<u>Ra</u> (226)

**Bloc s** : Il contient tous les éléments ayant une sous couche s en cours de remplissage. La configuration électronique de leurs couches de valence est de type :  $ns^x$  (x=1 ou 2).

•x=1 Famille des alcalins (Li, Na, K, Cs et Fr).

•x=2 Famille des alcalino-terreux (Be, Mg, Ca, Sr, Ba et Ra).

3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB	----- VIII -----			IB	IIB
3B	4B	5B	6B	7B	----- 8 -----			1B	2B

21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
<u>Sc</u>	<u>Ti</u>	<u>V</u>	<u>Cr</u>	<u>Mn</u>	<u>Fe</u>	<u>Co</u>	<u>Ni</u>	<u>Cu</u>	<u>Zn</u>
44.96	47.88	50.94	52.00	54.94	55.85	58.47	58.69	63.55	65.39
39	40	41	42	43	44	45	46	47	48
<u>Y</u>	<u>Zr</u>	<u>Nb</u>	<u>Mo</u>	<u>Tc</u>	<u>Ru</u>	<u>Rh</u>	<u>Pd</u>	<u>Ag</u>	<u>Cd</u>
88.91	91.22	92.91	95.94	(98)	101.1	102.9	106.4	107.9	112.4
57	72	73	74	75	76	77	78	79	80
<u>La*</u>	<u>Hf</u>	<u>Ta</u>	<u>W</u>	<u>Re</u>	<u>Os</u>	<u>Ir</u>	<u>Pt</u>	<u>Au</u>	<u>Hg</u>
138.9	178.5	180.9	183.9	186.2	190.2	190.2	195.1	197.0	200.5
89	104	105	106	107	108	109	110	111	112
<u>Ac</u>	<u>Rf</u>	<u>Db</u>	<u>Sg</u>	<u>Bh</u>	<u>Hs</u>	<u>Mt</u>	---	---	---
~ (227)	(257)	(260)	(263)	(262)	(265)	(266)	0	0	0

13	14	15	16	17	18
IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	vIII A
3A	4A	5A	6A	7A	8A
5	6	7	8	9	10
<u>B</u>	<u>C</u>	<u>N</u>	<u>O</u>	<u>F</u>	<u>Ne</u>
10.81	12.01	14.01	16.00	19.00	20.18
13	14	15	16	17	18
<u>Al</u>	<u>Si</u>	<u>P</u>	<u>S</u>	<u>Cl</u>	<u>Ar</u>
26.98	28.09	30.97	32.07	35.45	39.95
31	32	33	34	35	36
<u>Ga</u>	<u>Ge</u>	<u>As</u>	<u>Se</u>	<u>Br</u>	<u>Kr</u>
69.72	72.59	74.92	78.96	79.90	83.80
49	50	51	52	53	54
<u>In</u>	<u>Sn</u>	<u>Sb</u>	<u>Te</u>	<u>I</u>	<u>Xe</u>
114.8	118.7	121.8	127.6	126.9	131.3
81	82	83	84	85	86
<u>Tl</u>	<u>Pb</u>	<u>Bi</u>	<u>Po</u>	<u>At</u>	<u>Rn</u>
204.4	207.2	209.0	(210)	(210)	(222)
	114		116		118
	---		---		---
	0		0		0

Lanthanide Series\*

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
<u>Ce</u>	<u>Pr</u>	<u>Nd</u>	<u>Pm</u>	<u>Sm</u>	<u>Eu</u>	<u>Gd</u>	<u>Tb</u>	<u>Dy</u>	<u>Ho</u>	<u>Er</u>	<u>Tm</u>	<u>Yb</u>	<u>Lu</u>
140.1	140.9	144.2	(147)	150.4	152.0	157.3	158.9	162.5	164.9	167.3	168.9	173.0	175.0

Actinide Series~

90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
<u>Th</u>	<u>Pa</u>	<u>U</u>	<u>Np</u>	<u>Pu</u>	<u>Am</u>	<u>Cm</u>	<u>Bk</u>	<u>Cf</u>	<u>Es</u>	<u>Fm</u>	<u>Md</u>	<u>No</u>	<u>Lr</u>
232.0	(231)	(238)	(237)	(242)	(243)	(247)	(247)	(249)	(254)	(253)	(256)	(254)	(257)

# Period

Period	1	
	IA 1A	
	1 <u>H</u> 1.008	2 IIA 2A
	3 <u>Li</u> 6.941	4 <u>Be</u> 9.012
	11 <u>Na</u> 22.99	12 <u>Mg</u> 24.31
	19 <u>K</u> 39.10	20 <u>Ca</u> 40.08
	37 <u>Rb</u> 85.47	38 <u>Sr</u> 87.62
55 <u>Cs</u> 132.9	56 <u>Ba</u> 137.3	
87 <u>Fr</u> (223)	88 <u>Ra</u> (226)	

**On distingue particulièrement :**

- Le groupe des **halogènes** ( $ns^2np^5$ ) : F, cl, Br, I et At
- Le groupe de **gaz rare** ( $ns^2 np^6$ ) : He ( $1s^2$ ), Ne, Ar, Kr, Xe et Rn.

## Bloc p

Bloc p					18 vIII A 8A
13 IIIA 3A	14 IVA 4A	15 VA 5A	16 VIA 6A	17 VIIA 7A	2 <u>He</u> 4.003
5 <u>B</u> 10.81	6 <u>C</u> 12.01	7 <u>N</u> 14.01	8 <u>O</u> 16.00	9 <u>F</u> 19.00	10 <u>Ne</u> 20.18
13 <u>Al</u> 26.98	14 <u>Si</u> 28.09	15 <u>P</u> 30.97	16 <u>S</u> 32.07	17 <u>Cl</u> 35.45	18 <u>Ar</u> 39.95
31 <u>Ga</u> 69.72	32 <u>Ge</u> 72.59	33 <u>As</u> 74.92	34 <u>Se</u> 78.96	35 <u>Br</u> 79.90	36 <u>Kr</u> 83.80
49 <u>In</u> 114.8	50 <u>Sn</u> 118.7	51 <u>Sb</u> 121.8	52 <u>Te</u> 127.6	53 <u>I</u> 126.9	54 <u>Xe</u> 131.3
81 <u>Tl</u> 204.4	82 <u>Pb</u> 207.2	83 <u>Bi</u> 209.0	84 <u>Po</u> (210)	85 <u>At</u> (210)	86 <u>Rn</u> (222)
	114 <u>---</u> 0		116 <u>---</u> 0		118 <u>---</u> 0

Lanthanide  
Series\*

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
<u>Ce</u>	<u>Pr</u>	<u>Nd</u>	<u>Pm</u>	<u>Sm</u>	<u>Eu</u>	<u>Gd</u>	<u>Tb</u>	<u>Dy</u>	<u>Ho</u>	<u>Er</u>	<u>Tm</u>	<u>Yb</u>	<u>Lu</u>
140.1	140.9	144.2	(147)	150.4	152.0	157.3	158.9	162.5	164.9	167.3	168.9	173.0	175.0
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
<u>Th</u>	<u>Pa</u>	<u>U</u>	<u>Np</u>	<u>Pu</u>	<u>Am</u>	<u>Cm</u>	<u>Bk</u>	<u>Cf</u>	<u>Es</u>	<u>Fm</u>	<u>Md</u>	<u>No</u>	<u>Lr</u>
232.0	(231)	(238)	(237)	(242)	(243)	(247)	(247)	(249)	(254)	(253)	(256)	(254)	(257)

Actinide Series~



		Group**																						
Pe ri od	1 IA 1A		Bloc d																18 vIII A 8A					
	1 H 1.008	2 IIA 2A																	2 He 4.003					
1																								
2	3 Li 6.941	4 Be 9.012																	5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18
3	11 Na 22.99	12 Mg 24.31	3 IIIB 3B	4 IVB 4B	5 VB 5B	6 VIB 6B	7 VIIB 7B	8 ----- VIII ----- 8	9 VIII	10 8	11 IB 1B	12 IIB 2B	13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.07	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95						
4	19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.88	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.47	28 Ni 58.69	29 Cu 63.55	30 Zn 65.39	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	36 Kr 83.80						
5	37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.1	45 Rh 102.9	46 Pd 106.4	47 Ag 107.9	48 Cd 112.4	49 In 114.8	50 Sn 118.7	51 Sb 121.8	52 Te 127.6	53 I 126.9	54 Xe 131.3						
6	55 Cs 132.9	56 Ba 137.3		72 Hf 178.5	73 Ta 180.9	74 W 183.9	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 190.2	78 Pt 195.1	79 Au 197.0	80 Hg 200.5	81 Tl 204.4	82 Pb 207.2	83 Bi 209.0	84 Po (210)	85 At (210)	86 Rn (222)						
7	87 Fr (223)	88 Ra (226)		104 Rf (257)	105 Db (260)	106 Sg (263)	107 Bh (262)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 ---	111 ---	112 ---		114 ---		116 ---		118 ---						

Lanthanide Series*	58 <u>Ce</u> 140.1	59 <u>Pr</u> 140.9	60 <u>Nd</u> 144.2	61 <u>Pm</u> (147)	62 <u>Sm</u> 150.4	63 <u>Eu</u> 152.0	64 <u>Gd</u> 157.3	65 <u>Tb</u> 158.9	66 <u>Dy</u> 162.5	67 <u>Ho</u> 164.9	68 <u>Er</u> 167.3	69 <u>Tm</u> 168.9	70 <u>Yb</u> 173.0	71 <u>Lu</u> 175.0
Actinide Series~	90 <u>Th</u> 232.0	91 <u>Pa</u> (231)	92 <u>U</u> (238)	93 <u>Np</u> (237)	94 <u>Pu</u> (242)	95 <u>Am</u> (243)	96 <u>Cm</u> (247)	97 <u>Bk</u> (247)	98 <u>Cf</u> (249)	99 <u>Es</u> (254)	100 <u>Fm</u> (253)	101 <u>Md</u> (256)	102 <u>No</u> (254)	103 <u>Lr</u> (257)

		Group**																						
Pe ri od	1																	18						
	IA 1A																	vIII A 8A						
1	1 <u>H</u> 1.008	2 IIA 2A																	13 IIIA 3A	14 IVA 4A	15 VA 5A	16 VIA 6A	17 VIIA 7A	2 <u>He</u> 4.003
2	3 <u>Li</u> 6.941	4 <u>Be</u> 9.012																	5 <u>B</u> 10.81	6 <u>C</u> 12.01	7 <u>N</u> 14.01	8 <u>O</u> 16.00	9 <u>F</u> 19.00	10 <u>Ne</u> 20.18
3	11 <u>Na</u> 22.99	12 <u>Mg</u> 24.31	3 IIIB 3B	4 IVB 4B	5 VB 5B	6 VIB 6B	7 VIIB 7B	8 ----- -----	9 VIII 8	10 ----- -----	11 IB 1B	12 IIB 2B	13 <u>Al</u> 26.98	14 <u>Si</u> 28.09	15 <u>P</u> 30.97	16 <u>S</u> 32.07	17 <u>Cl</u> 35.45	18 <u>Ar</u> 39.95						
4	19 <u>K</u> 39.10	20 <u>Ca</u> 40.08	21 <u>Sc</u> 44.96	22 <u>Ti</u> 47.88	23 <u>V</u> 50.94	24 <u>Cr</u> 52.00	25 <u>Mn</u> 54.94	26 <u>Fe</u> 55.85	27 <u>Co</u> 58.47	28 <u>Ni</u> 58.69	29 <u>Cu</u> 63.55	30 <u>Zn</u> 65.39	31 <u>Ga</u> 69.72	32 <u>Ge</u> 72.59	33 <u>As</u> 74.92	34 <u>Se</u> 78.96	35 <u>Br</u> 79.90	36 <u>Kr</u> 83.80						
5	37 <u>Rb</u> 85.47	38 <u>Sr</u> 87.62	39 <u>Y</u> 88.91	40 <u>Zr</u> 91.22	41 <u>Nb</u> 92.91	42 <u>Mo</u> 95.94	43 <u>Tc</u> (98)	44 <u>Ru</u> 101.1	45 <u>Rh</u> 102.9	46 <u>Pd</u> 106.4	47 <u>Ag</u> 107.9	48 <u>Cd</u> 112.4	49 <u>In</u> 114.8	50 <u>Sn</u> 118.7	51 <u>Sb</u> 121.8	52 <u>Te</u> 127.6	53 <u>I</u> 126.9	54 <u>Xe</u> 131.3						
6	55 <u>Cs</u> 132.9	56 <u>Ba</u> 137.3	57 <u>La*</u> 138.9	72 <u>Hf</u> 178.5	73 <u>Ta</u> 180.9	74 <u>W</u> 183.9	75 <u>Re</u> 186.2	76 <u>Os</u> 190.2	77 <u>Ir</u> 190.2	78 <u>Pt</u> 195.1	79 <u>Au</u> 197.0	80 <u>Hg</u> 200.5	81 <u>Tl</u> 204.4	82 <u>Pb</u> 207.2	83 <u>Bi</u> 209.0	84 <u>Po</u> (210)	85 <u>At</u> (210)	86 <u>Rn</u> (222)						
7	87 <u>Fr</u> (223)	88 <u>Ra</u> (226)	89 <u>Ac</u> ~ (227)	104 <u>Rf</u> (257)	105 <u>Db</u> (260)	106 <u>Sg</u> (263)	107 <u>Bh</u> (262)	108 <u>Hs</u> (265)	109 <u>Mt</u> (266)	110 --- 0	111 --- 0	112 --- 0		114 --- 0		116 --- 0		118 --- 0						

**Bloc f :** Il contient tous les éléments ayant une sous couche f en cours de remplissage. La configuration électronique de leurs couches de valence est de type : (n-2) f<sup>x</sup> (n-1) d<sup>10</sup> n s<sup>2</sup> (n≥6 et 1≤ x≤14). Il sont appelés les terres rares et forment deux séries d'éléments : **Lanthanides** (n=6) et **Actinides** (n=7).

**Bloc f :** Il contient tous les éléments ayant une sous couche f en cours de remplissage. La configuration électronique de leurs couches de valence est de type :  $(n-2) f^x (n-1) d^{10} n s^2$  ( $n \geq 6$  et  $1 \leq x \leq 14$ ). Ils sont appelés les terres rares et forment deux séries d'éléments : **Lanthanides** ( $n=6$ ) et **Actinides** ( $n=7$ ).

## Bloc f

Lanthanide Series*	58 <u>Ce</u> 140.1	59 <u>Pr</u> 140.9	60 <u>Nd</u> 144.2	61 <u>Pm</u> (147)	62 <u>Sm</u> 150.4	63 <u>Eu</u> 152.0	64 <u>Gd</u> 157.3	65 <u>Tb</u> 158.9	66 <u>Dy</u> 162.5	67 <u>Ho</u> 164.9	68 <u>Er</u> 167.3	69 <u>Tm</u> 168.9	70 <u>Yb</u> 173.0	71 <u>Lu</u> 175.0
Actinide Series~	90 <u>Th</u> 232.0	91 <u>Pa</u> (231)	92 <u>U</u> (238)	93 <u>Np</u> (237)	94 <u>Pu</u> (242)	95 <u>Am</u> (243)	96 <u>Cm</u> (247)	97 <u>Bk</u> (247)	98 <u>Cf</u> (249)	99 <u>Es</u> (254)	100 <u>Fm</u> (253)	101 <u>Md</u> (256)	102 <u>No</u> (254)	103 <u>Lr</u> (257)

The diagram illustrates the periodic table with the following distribution of elements:

- Group 1:** alcalins
- Group 2:** alcalino-terreux
- Groups 3-10:** métaux de transition
- Group 11:** métaux
- Group 12:** métaux
- Group 13:** métaux
- Group 14:** métaux
- Group 15:** métaux
- Group 16:** non-métaux
- Group 17:** halogènes
- Group 18:** gaz rares
- Periods 5 and 6:** lanthanides and actinides (shown as separate rows below the main table)

## Groupes du tableau périodique

les groupes du T.P sont désignés par un chiffre romain représentant le nombre d'électrons de valence ( à l'exception du groupe VIII) suivie d'une lettre A ou B pour préciser la nature de l'orbital contenant ces électrons:

**Groupe A :** les électrons de valence sont de type **s** ou **s** et **p**.

**Groupe B** : les électrons **d** font partie des électrons de valence

Classification périodique des éléments (officielle)																			
	Nombre d'électrons dans la sous-couche en remplissage :																		
	1	2			1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	1	2	3	4	5
$\ell$	0		2										1						
	Bloc s		Bloc d										Bloc p						
n																			
1	K	H											He						
2	L	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	M	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	N	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	O	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	P	Cs	Ba	57 à 71	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
7	Q	Fr	Ra	89 à 103	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Uuu	Uub	113	Uuq	115	Uuh	117	Uuo

Détail des lanthanides et actinides (Bloc f)																
		Nombre d'électrons dans la sous-couche en remplissage :														
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
n																
6	P	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
7	Q	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

# Le tableau périodique (18 colonnes, 7 périodes)

http://www.kjf-split.kz/periodic/fr/

PÉRIODE	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	IA	IIA	GROUPE CAS										IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIIIA
1	1 1.0079 <b>H</b> HYDROGÈNE																	2 4.0026 <b>He</b> HÉLIUM
2	3 6.941 <b>Li</b> LITHIUM	4 9.0122 <b>Be</b> BÉRYLLIUM											5 10.811 <b>B</b> BORE	6 12.011 <b>C</b> CARBONE	7 14.007 <b>N</b> AZOTE	8 15.999 <b>O</b> OXYGÈNE	9 18.998 <b>F</b> FLUOR	10 20.180 <b>Ne</b> NÉON
3	11 22.990 <b>Na</b> SODIUM	12 24.305 <b>Mg</b> MAGNÉSIMUM											13 26.982 <b>Al</b> ALUMINIUM	14 28.086 <b>Si</b> SILICIUM	15 30.974 <b>P</b> PHOSPHORE	16 32.065 <b>S</b> SOUFRE	17 35.453 <b>Cl</b> CHLORE	18 39.948 <b>Ar</b> ARGON
4	19 39.098 <b>K</b> POTASSIUM	20 40.078 <b>Ca</b> CALCIUM	21 44.956 <b>Sc</b> SCANDIUM	22 47.867 <b>Ti</b> TITANE	23 50.942 <b>V</b> VANADIUM	24 51.996 <b>Cr</b> CHROME	25 54.938 <b>Mn</b> MANGANÈSE	26 55.845 <b>Fe</b> FER	27 58.933 <b>Co</b> COBALT	28 58.693 <b>Ni</b> NICKEL	29 63.546 <b>Cu</b> COUVRE	30 65.39 <b>Zn</b> ZINC	31 69.723 <b>Ga</b> GALLIUM	32 72.64 <b>Ge</b> GERMANIUM	33 74.922 <b>As</b> ARSENIC	34 78.96 <b>Se</b> SÉLÉNIUM	35 79.904 <b>Br</b> BROME	36 83.80 <b>Kr</b> KRYPTON
5	37 85.468 <b>Rb</b> RUBIDIUM	38 87.62 <b>Sr</b> STRONTIUM	39 88.906 <b>Y</b> YTTRIUM	40 91.224 <b>Zr</b> ZIRCONIUM	41 92.906 <b>Nb</b> NIOBIUM	42 95.94 <b>Mo</b> MOLYBDÈNE	43 (98) <b>Tc</b> TECHNÉTIUM	44 101.07 <b>Ru</b> RUTHÉNIUM	45 102.91 <b>Rh</b> RHODIUM	46 106.42 <b>Pd</b> PALLADIUM	47 107.87 <b>Ag</b> ARGENT	48 112.41 <b>Cd</b> CADMIUM	49 114.82 <b>In</b> INDIUM	50 118.71 <b>Sn</b> ETAIN	51 121.76 <b>Sb</b> ANTIMOINE	52 127.60 <b>Te</b> TELLURE	53 126.90 <b>I</b> IODE	54 131.29 <b>Xe</b> XÉNON
6	55 132.91 <b>Cs</b> CÉSIMUM	56 137.33 <b>Ba</b> BARYUM	57-71 <b>La-Lu</b> Lanthanides	72 178.49 <b>Hf</b> HAFNIUM	73 180.95 <b>Ta</b> TANTALE	74 183.84 <b>W</b> TUNGSTÈNE	75 186.21 <b>Re</b> RHÉNIUM	76 190.23 <b>Os</b> OSMIUM	77 192.22 <b>Ir</b> IRIDIUM	78 195.08 <b>Pt</b> PLATINE	79 196.97 <b>Au</b> OR	80 200.59 <b>Hg</b> MERCURE	81 204.38 <b>Tl</b> THALLIUM	82 207.2 <b>Pb</b> PLOMB	83 208.98 <b>Bi</b> BISMUTH	84 (209) <b>Po</b> POLONIUM	85 (210) <b>At</b> ASTATE	86 (222) <b>Rn</b> RADON
7	87 (223) <b>Fr</b> FRANCIUM	88 (226) <b>Ra</b> RADIUM	89-103 <b>Ac-Lr</b> Actinides	104 (261) <b>Rf</b> RUTHÉRFORDIUM	105 (262) <b>Db</b> DUBNIUM	106 (266) <b>Sg</b> SEABORGIUM	107 (264) <b>Bh</b> BOHRRIUM	108 (277) <b>Hs</b> HASSIUM	109 (268) <b>Mt</b> MEITNERIUM	110 (281) <b>Uu</b> UNUNNIUM	111 (272) <b>Uu</b> UNUNUNIUM	112 (285) <b>Uu</b> UNUNBIUM	114 (289) <b>Uu</b> UNUNQUADIUM					

(1) Pure Appl. Chem., 73, No. 4, 657-663 (2001)

La masse atomique relative est donnée avec cinq chiffres significatifs. Pour les éléments qui n'ont pas de nucléides stables, la valeur entre parenthèses indique le nombre de masse de l'isotope de l'élément ayant la durée de vie la plus grande.

Toutefois, pour les trois éléments Th, Pa et U qui ont une composition isotopique terrestre connue, une masse atomique est indiquée.

Editor: Michel D'Elia

#### LANTHANIDES

57 138.91 <b>La</b> LANTHANE	58 140.12 <b>Ce</b> CÉRIUM	59 140.91 <b>Pr</b> PRASEODYME	60 144.24 <b>Nd</b> NÉODYME	61 (145) <b>Pm</b> PROMÉTHIUM	62 150.36 <b>Sm</b> SAMARIUM	63 151.96 <b>Eu</b> EUROPIUM	64 157.25 <b>Gd</b> GADOLINIUM	65 158.93 <b>Tb</b> TERBIUM	66 162.50 <b>Dy</b> DYSPROSIUM	67 164.93 <b>Ho</b> HOLMIUM	68 167.26 <b>Er</b> ERBIUM	69 168.93 <b>Tm</b> THULIUM	70 173.04 <b>Yb</b> YTTERBIUM	71 174.97 <b>Lu</b> LUTÉTIUM
------------------------------------	----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	-------------------------------------	------------------------------------

#### ACTINIDES

89 (227) <b>Ac</b> ACTINIUM	90 232.04 <b>Th</b> THORIUM	91 231.04 <b>Pa</b> PROTACTINIUM	92 238.03 <b>U</b> URANIUM	93 (237) <b>Np</b> NEPTUNIUM	94 (244) <b>Pu</b> PLUTONIUM	95 (243) <b>Am</b> AMÉRICIUM	96 (247) <b>Cm</b> CURIUM	97 (247) <b>Bk</b> BERKÉLIUM	98 (251) <b>Cf</b> CALIFORNIUM	99 (252) <b>Es</b> EINSTEINIUM	100 (257) <b>Fm</b> FERMIUM	101 (258) <b>Md</b> MENDELÉVUM	102 (259) <b>No</b> NOBÉLIUM	103 (262) <b>Lr</b> LAWRENCIUM
-----------------------------------	-----------------------------------	--	----------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	---------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------------	-----------------------------------	--------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------------

# Les familles d'éléments

✓ Les **gaz rares** (dernière colonne) : He, Ne, Ar, ...

Configuration électronique  $ns^2 np^6$  avec  $n=1,2,\dots$

Notation de Lewis  $\boxed{\overline{\text{X}}}$

Ces éléments sont très stables (couche s et p complètes, règle de l'octet), chimiquement inertes

✓ Les **métaux alcalins** (1ère colonne) : Li, Na, K....

Configuration électronique  $ns^1$  avec  $n=2,3,\dots$

Notation de Lewis  $\text{X}^\bullet$

L'électron unique de la couche de valence peut être perdu facilement, selon la réaction d'ionisation :



L'ion obtenu  $\text{X}^+$  est très stable car isoélectronique du gaz rare précédent

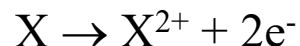
L'énergie d'ionisation  $E_i$  nécessaire pour arracher cet électron est très faible

✓ Les **alcalinos-terreux** (2ème colonne) : Mg, Ca ....

Configuration électronique  $ns^2$  avec  $n=2,3,\dots$

Notation de Lewis  $\text{X} \mid$

Les 2 électrons de la couche de valence peuvent être perdus facilement, selon la réaction :



L'ion obtenu  $\text{X}^{2+}$  est très stable car isoélectronique du gaz rare précédent.



# Les familles d'éléments

✓ Les **halogènes** (avant dernière colonne) : F , Cl , Br, I ....

Configuration électronique  $ns^2np^5$  avec  $n=2,3,\dots$

Notation de Lewis  $\boxed{\text{X}}\cdot$

Il leur manque un électron pour avoir une couche de valence complète. Ils peuvent donc facilement capter un électron, selon la réaction :  $\text{X} + e^- \rightarrow \text{X}^-$

Leur affinité électronique est donc élevée.

✓ Les **chalcogènes** (colonne avant les halogènes) : O , S ....

Configuration électronique  $ns^2np^4$  avec  $n=2,3,\dots$

Notation de Lewis  $\text{X} \text{ : } \text{O} \text{ :}$

Il leur manque deux électrons pour avoir une couche de valence complète. Ils peuvent donc facilement capter deux électrons, selon la réaction :  $\text{X} + 2e^- \rightarrow \text{X}^{2-}$

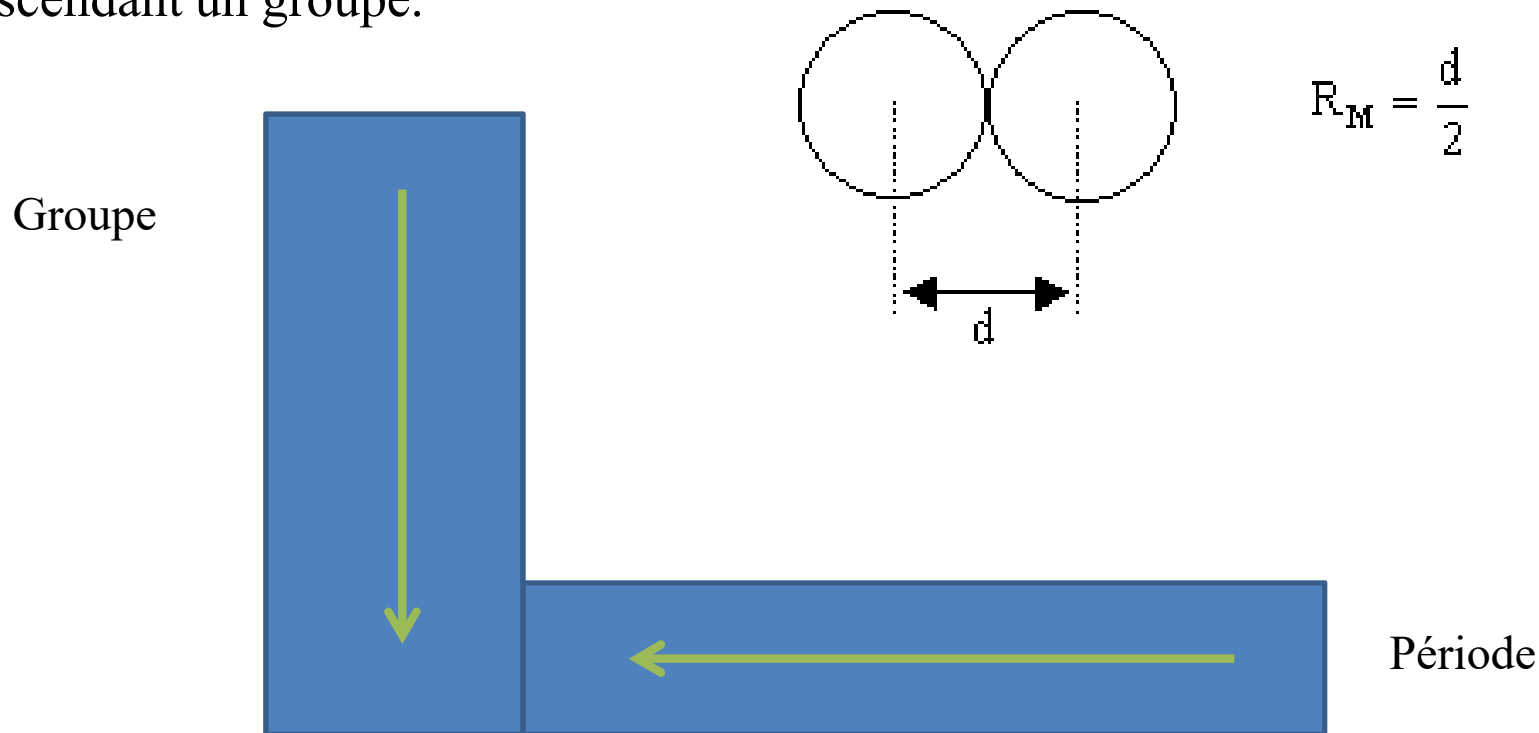
## **II-Périodicité de propriétés des éléments**



## Rayon atomique

Le rayon atomique  $R_M$  d'un élément est défini comme la moitié de la distance entre deux atomes voisins de cet élément pris dans les conditions standard.

$R_M$  diminue en traversant une période de gauche à droite et augmente en descendant un groupe.



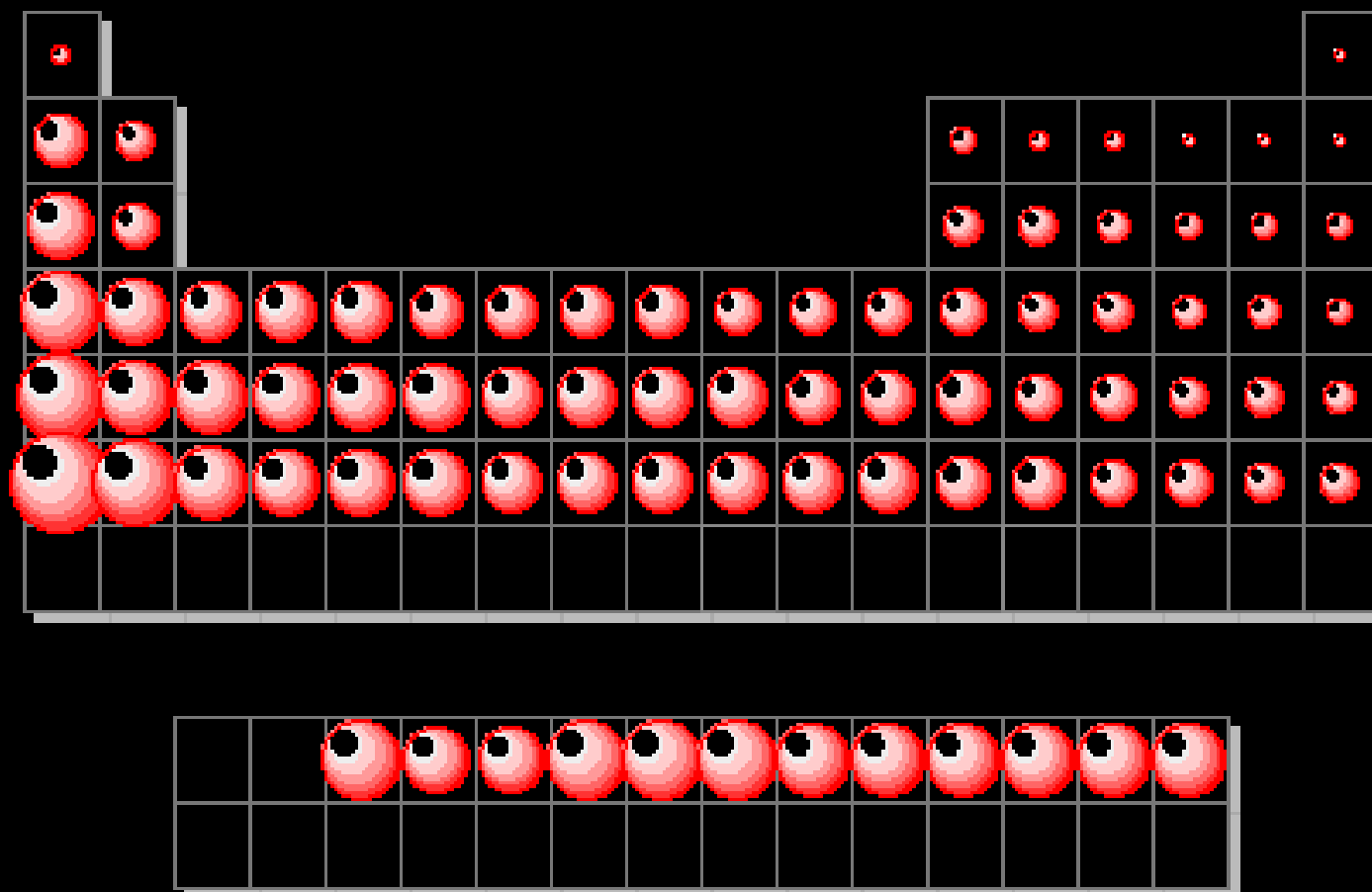
$$r = \frac{n^2}{Z_{eff}} a_0$$

## Explication

Lorsque, dans une période, on évolue de gauche à droite, la charge nucléaire augmente de sorte que l'attraction nucléaire augmente elle aussi. Il s'ensuit que les rayons atomiques des éléments diminuent dans une période, de gauche à droite.

Lorsqu'on descend dans une colonne, la charge nucléaire augmente, de sorte que l'attraction nucléaire augmente elle aussi. Dès lors, on s'attend à ce que les rayons atomiques diminuent . Cela n'est pas le cas, puisque les électrons les plus externes se font abriter dans de couches nouvelles ce qui génère un effet qui l'emporte sur l'attraction nucléaire. Il s'ensuit alors que les rayons atomiques des éléments augmentent dans une colonne, de haut en bas.

## Rayons atomiques représentés selon la taille de sphères



©Mark Winter 1999 [web@lements@sheffield.ac.uk]

# Potentiel d'ionisation

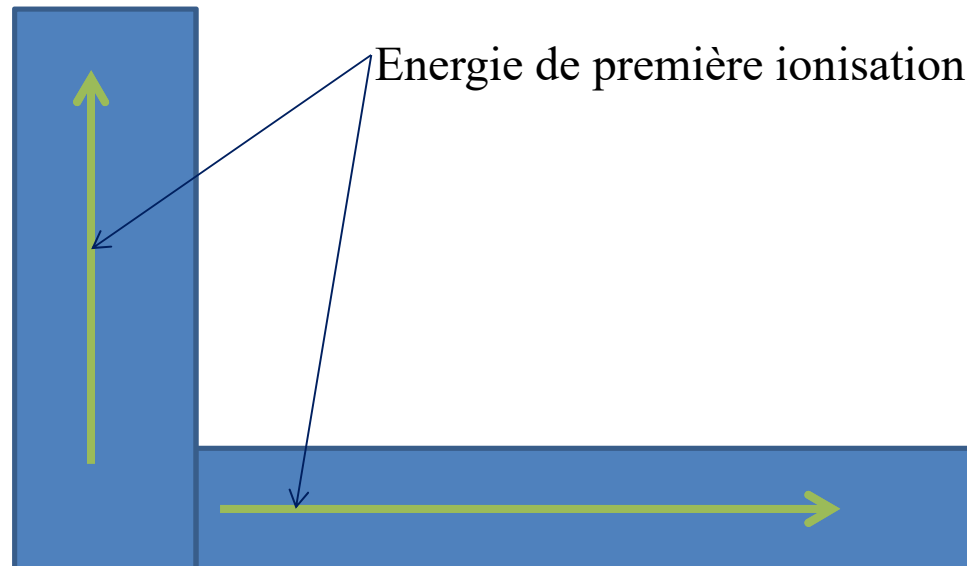
Le potentiel d'ionisation  $I_1$  est l'énergie qu'il convient de fournir à un atome  $A$  pour lui arracher un électron.

$E_i$  est  $>0$  et est exprimée en eV ( $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ )



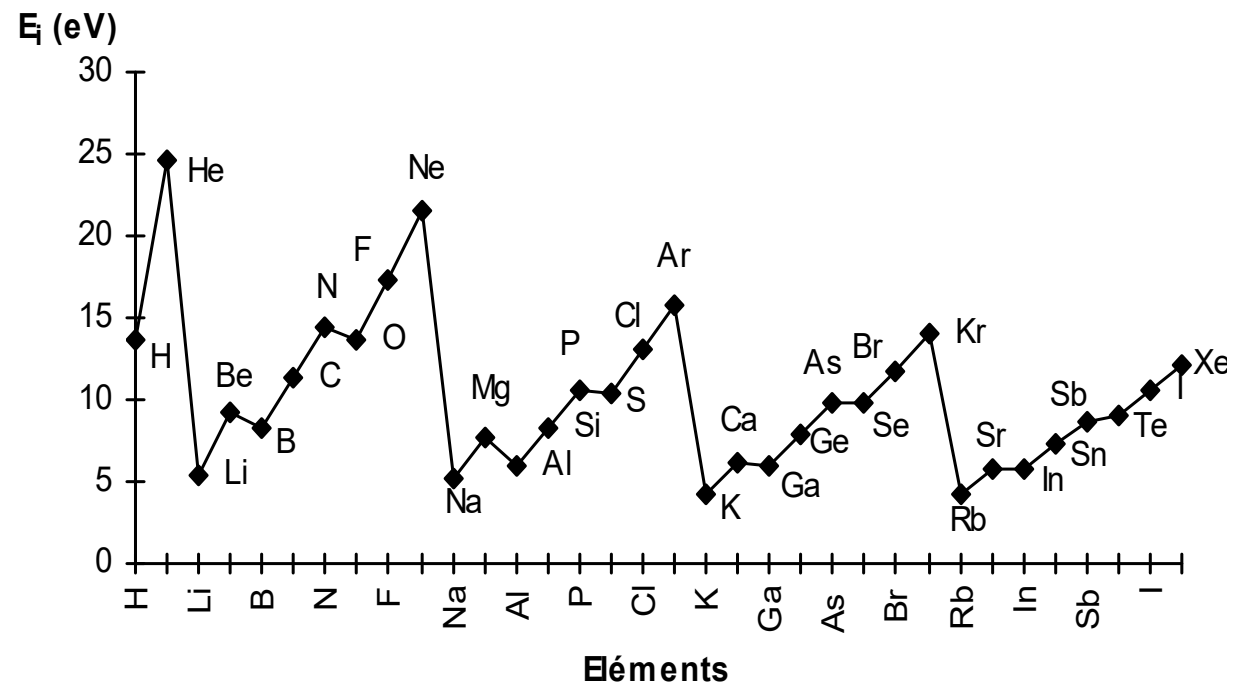
$I_1$  correspond au potentiel de première ionisation. Il existe, bien entendu, un potentiel de deuxième ionisation si on extrait un second électron, etc...

$I_1$  augmente en traversant une période de gauche à droite et diminue en descendant un groupe.



# Potentiel d'ionisation

Energies de première ionisation des éléments principaux



## Explication:

Lorsque, dans une période, on évolue de gauche à droite, le nombre d'électrons les plus externes augmente. Dès lors, l'attraction nucléaire vis-à-vis de ces électrons augmente elle aussi. Or plus cette attraction est élevée, moins facilement on arrache un de ces électrons. Il s'ensuit alors que, l'énergie de première ionisation augmente dans une période, de gauche à droite.

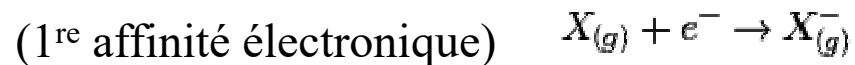
Lorsqu'on descend dans une colonne, l'électron à extraire est de plus en plus éloigné par rapport au noyau de l'atome. Dès lors, l'attraction nucléaire vis-à-vis de cet électron diminue. Or, plus cette attraction est faible, plus facilement on arrache l'électron. Il s'ensuit alors que, l'énergie de première ionisation diminue dans une colonne, de haut en bas.

# Affinité électronique

L'**affinité électronique**, parfois notée **AE** ou **A**, est la quantité d'énergie dégagée suite à la capture d'un électron par un atome en phase gazeuse.

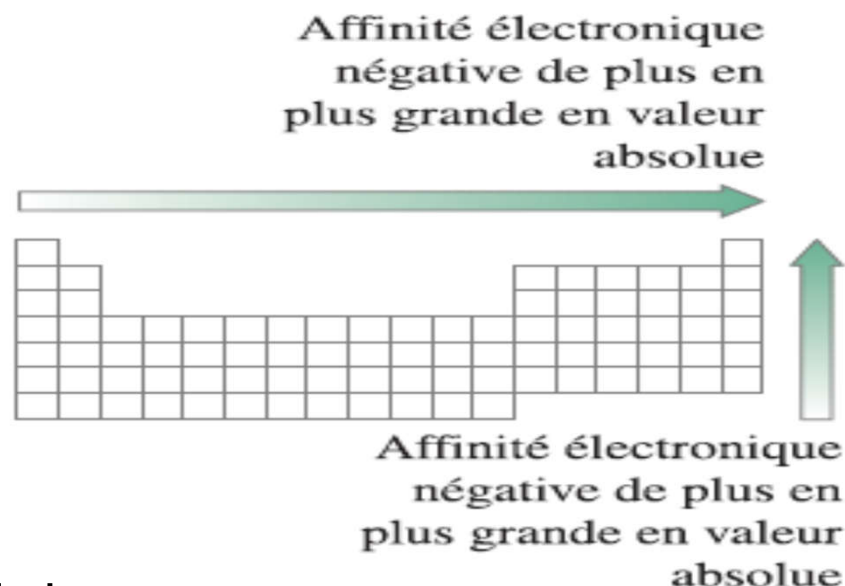
Plus l'affinité électronique est grande plus la capture d'un électron par l'atome dégage de l'énergie et plus cette capture est stable. Une affinité électronique négative signifie au contraire qu'il faut fournir de l'énergie à l'atome pour lui arracher un électron

De façon générale pour un élément X la réaction associée à l'affinité électronique est :

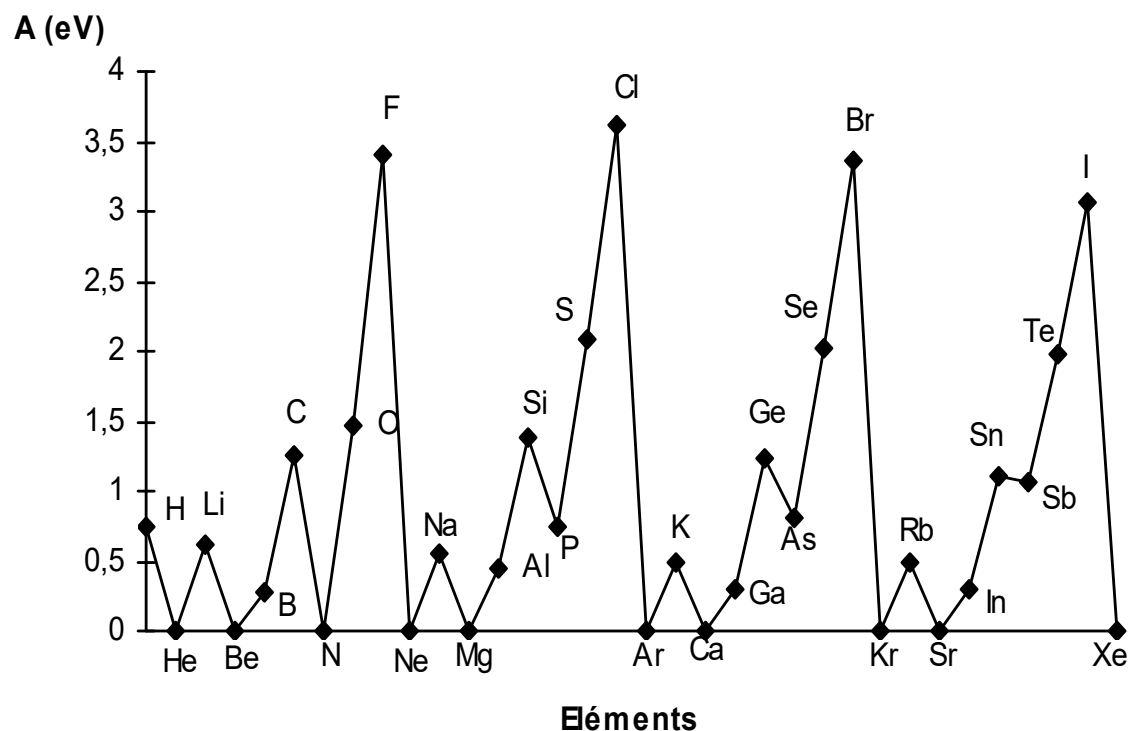


$A_e$  est  $>0$  et est exprimée en eV ( $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ )

L'**affinité électronique** dépend a peu près des mêmes facteurs que l'énergie d'ionisation ( $Z_{\text{eff}}$ , distance noyau-électron) ; mais la symétrie sphérique est plus importante → variation plus irrégulière de gauche à droite dans une rangée



**Affinité électronique des éléments principaux**





## Electronégativité

L'électronégativité  $\chi$  d'un élément est la tendance que possède cet élément à attirer un électron.

Les notions de potentiel d'ionisation et d'affinité électronique sont relatives à un atome seul. Par contre, la notion d'électronégativité sera davantage utilisée par la suite car elle intervient quand l'atome se trouve associé à d'autres atomes.

Il y a plusieurs définitions de l'électronégativité, qui n'est pas une grandeur mesurable comme  $E_i$  et  $A_e$  : celle de Pauling, de Mulliken ou de Allred-Rochow.

La plus utilisée en chimie est celle de Pauling

$$\chi_A - \chi_B = 0.102 \sqrt{E_{A-B} - \sqrt{E_{A-A} \times E_{B-B}}}$$

Mais celle de Mulliken a une définition simple :

$$\chi = 0,317 \frac{E_I + A_e}{2}$$

$\chi$  est d'autant plus forte que l'élément peut capturer un électron ( $A_e$  fort)

$\chi$  est d'autant plus faible que l'élément peut libérer un électron ( $E_i$  faible)

# Electronégativité

## Remarques :

- 1)  $\chi$  augmente en traversant une période de gauche à droite et diminue en descendant un groupe du tableau périodique.
- 2) Les éléments en bas et à gauche du tableau périodique ont tendance à céder facilement leurs électrons de valence à un partenaire lors de la formation d'une liaison chimique. **On dit qu'ils sont électropositifs.**
- 3) Les éléments en haut et à droite du tableau périodique ont tendance à capter facilement les électrons de valence d'un partenaire lors de la formation d'une liaison chimique. **On dit qu'ils sont électronégatifs.**

**La différence d'électronégativité** entre les atomes liés A et B :

$\Delta\chi = \chi(\text{A}) - \chi(\text{B})$  est donc une mesure directe de la distribution électronique des électrons de valence qui assurent la liaison chimique. **Cette différence est le critère qui permet de classer les liaisons chimiques.**

## **Ion le plus stable**

L'ion le plus stable de chaque élément est celui possédant la structure du gaz rare le plus proche.

### **Exemple:**

Ecrivez l'ion le plus stable des atomes suivantes:

Na ( $Z=11$ ) ,

O ( $Z=8$ ) ,

Sr ( $Z=38$ ),

Cl ( $Z=17$ ) ,

Li ( $Z=3$ )

# Valence

La capacité de chaque atome à former une liaison, sa valeur est égale au nombre des électrons célibataires.

<b>Atome monovalent</b>	<b>Atome divalent</b>	<b>Atome trivalent</b>	<b>Atome tétravalent</b>
H, Li, Na, K... F, Cl, Br, I...	Be, Mg, Ca... O, S...	B, Al... N, P...	C, Si...

## Propriétés magnétiques

**Diamagnétisme** : les atomes ou molécules ne possédant pas des électrons célibataires sont dits diamagnétique.

**Paramagnétisme** : les atomes ou molécules possédant des électrons célibataires sont dits paramagnétique.

# *Introduction à la liaison chimique*

## *Définitions*

- ✓ Liaison chimique est due à un réarrangement des électrons de valence.
- ✓ Liaison chimique est un phénomène physique qui lie les atomes entre eux en échangeant ou en partageant un ou plusieurs électrons.
- ✓ Les atomes sont associés pour former des molécules

# *Objectifs du chapitre*

➤ Connaître les bases des différentes liaisons chimiques existantes:

▣ ✓ Liaisons covalentes

▣ ✓ Liaisons ioniques

▣ ✓ Liaisons métalliques

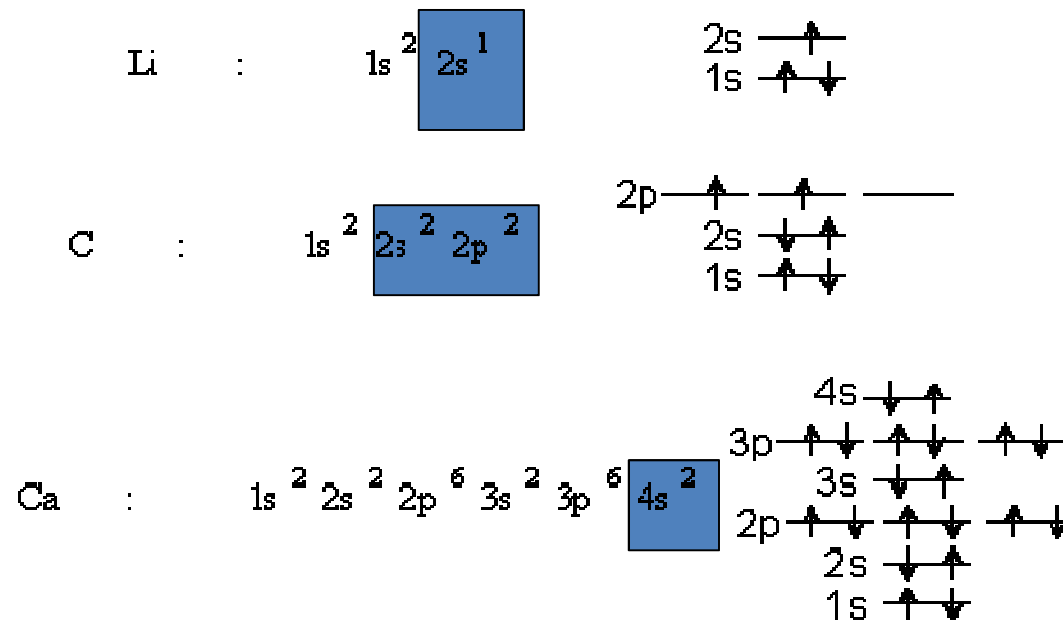
➤ Utiliser la règle de l'octet pour expliquer ces liaisons

➤ Comprendre la relation entre la différence d'électronégativité et le type de liaison.



## *Formation des liaisons chimiques*

- ✓ Lors de la formation des liaisons chimiques, seules les couches électroniques périphériques, non complètes, entrent en contact.
- ✓ Les électrons de cette couche sont appelés électrons de valence



## *La liaison chimique*

La liaison s'établit entre atomes pour leur permettre **d'adopter la configuration électronique du gaz rare**

Et respecter ainsi **la règle de l'octet qui** stipule que tout atome, exception faite de l'hydrogène, a tendance à former des liaisons jusqu'à l'obtention de huit électrons de valence.

Les liaisons se classent en différents types;

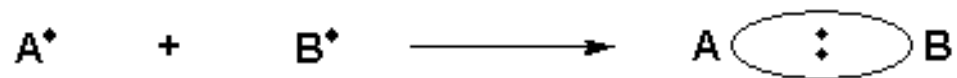
- La liaison covalente
  - ✓ pure
  - ✓ polarisée
  - ✓ dative ou semi polaire
- La liaison ionique.
- La liaison métallique.

### *Liaison covalente:*



La liaison est covalente pure dans  $\text{H}_2$ ,  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{F}_2$ , ... Deux atomes de nature identique partagent « équitablement » les électrons.

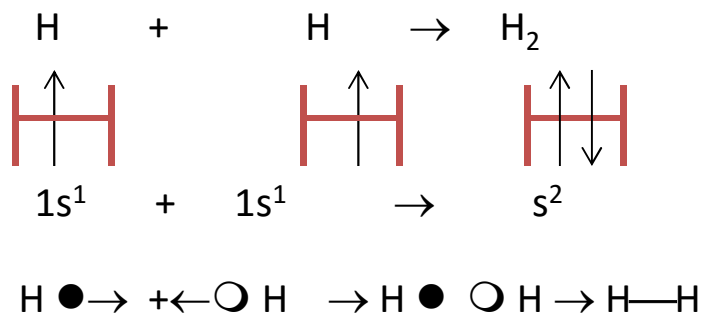
## *Liaison covalente non polaire :*



1 électron  
de valence

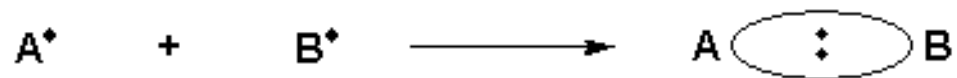
1 électron  
de valence

2 électrons partagés  
symétrique  
1 paire liante



Le même raisonnement s'applique à  $\text{Li}_2$  ou à  $\text{F}_2$

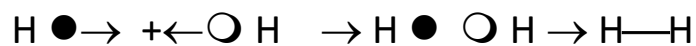
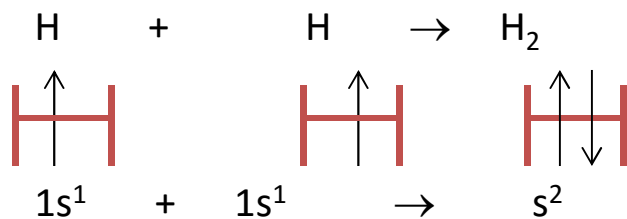
## *Liaison covalente non polaire :*



1 électron  
de valence

1 électron  
de valence

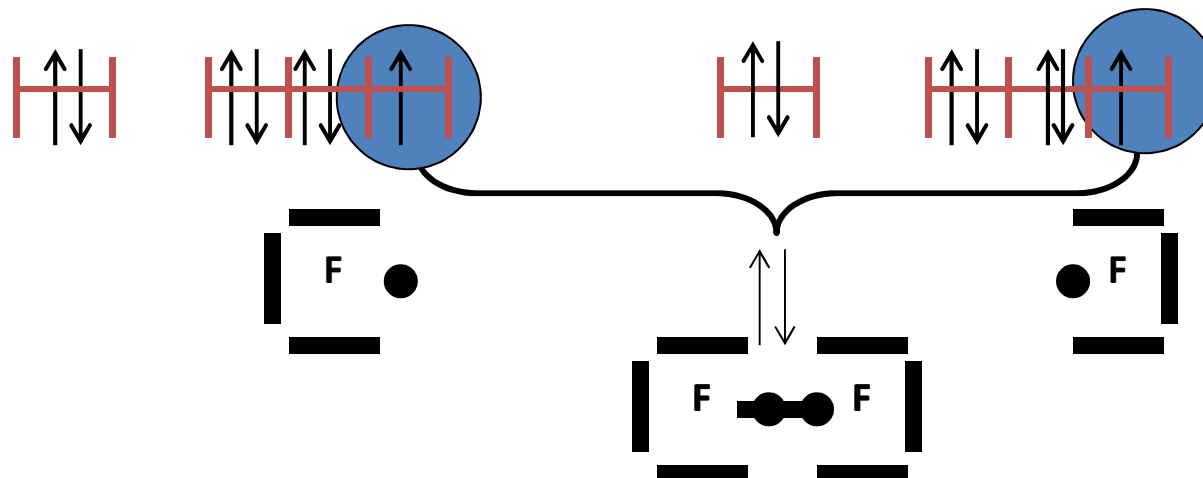
2 électrons partagés  
symétrique  
1 paire liante



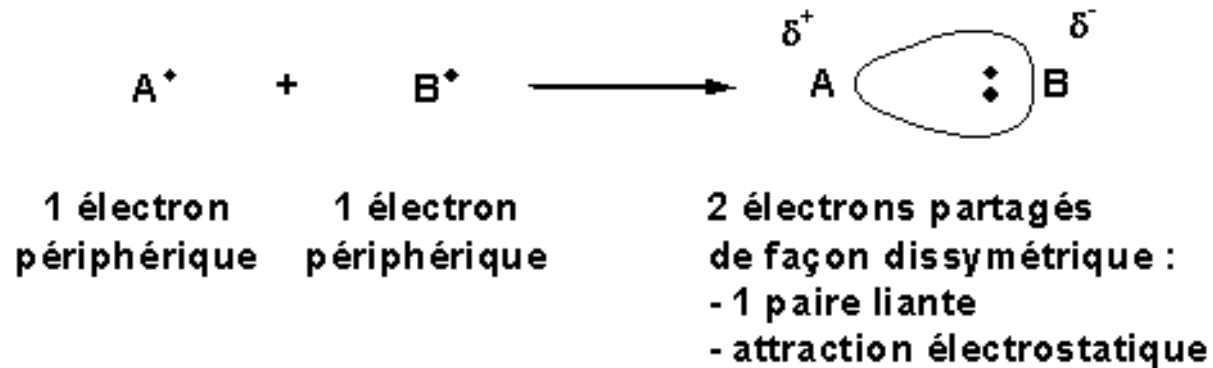
Le même raisonnement s'applique à  $\text{Li}_2$  ou à  $\text{F}_2$

F  $2s^2 2p^5$

F  $2s^2 2p^5$



### *Liaison covalente polarisée*

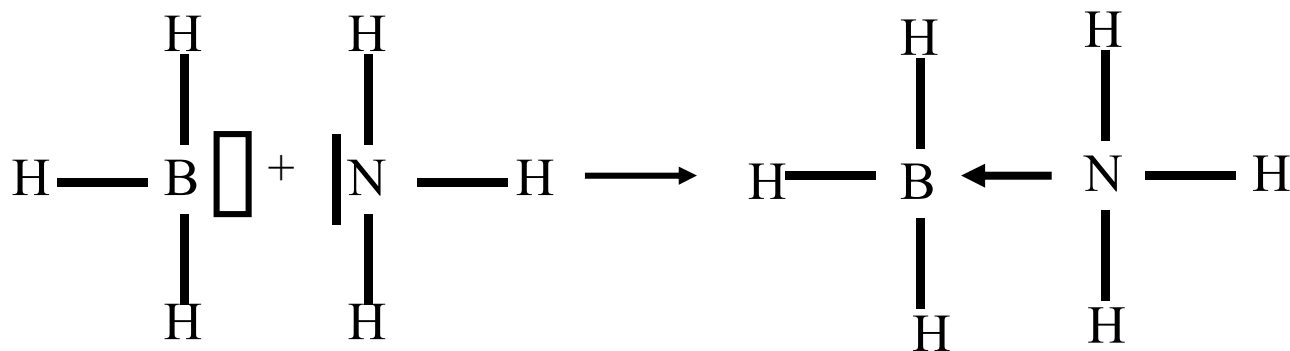


La liaison entre deux atomes de nature différente est covalente polarisée.

La polarisation provient de la tendance d'un des deux atomes à attirer « préférentiellement » les électrons. (s'effectue entre deux atomes dont leurs électronégativités est différentes)

## *Les liaisons datives*

Lorsqu'un atome d'une molécule ne satisfait pas l'octet, il peut se lier à une autre molécule et former une nouvelle liaison qui l'amènera à respecter l'octet.



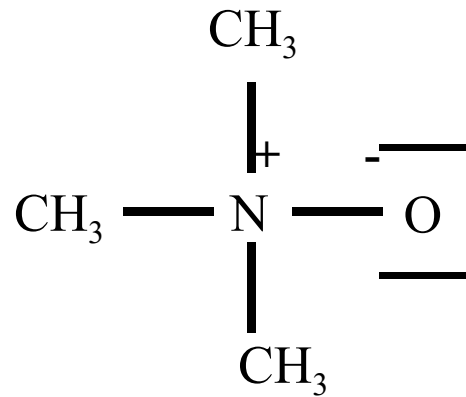
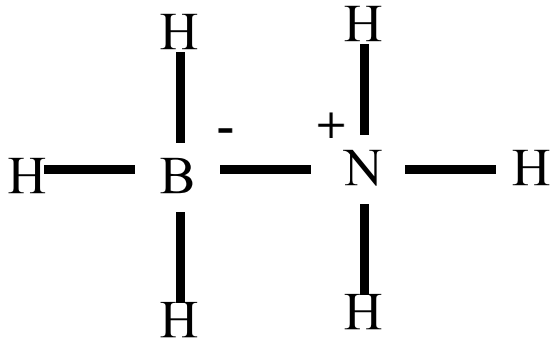
Liaison covalente dative : la paire électronique (ou doublet) assurant la liaison appartient à l'atome « donneur », l'atome « accepteur » doit alors avoir une orbitale atomique vide.

Cette liaison est représentée par une flèche dans le sens donneur → accepteur

Les liaisons datives sont aussi appelées «semi-polaires»

On peut faire figurer une charge formelle positive sur le donneur de la paire électronique et une charge formelle négative sur l'accepteur.

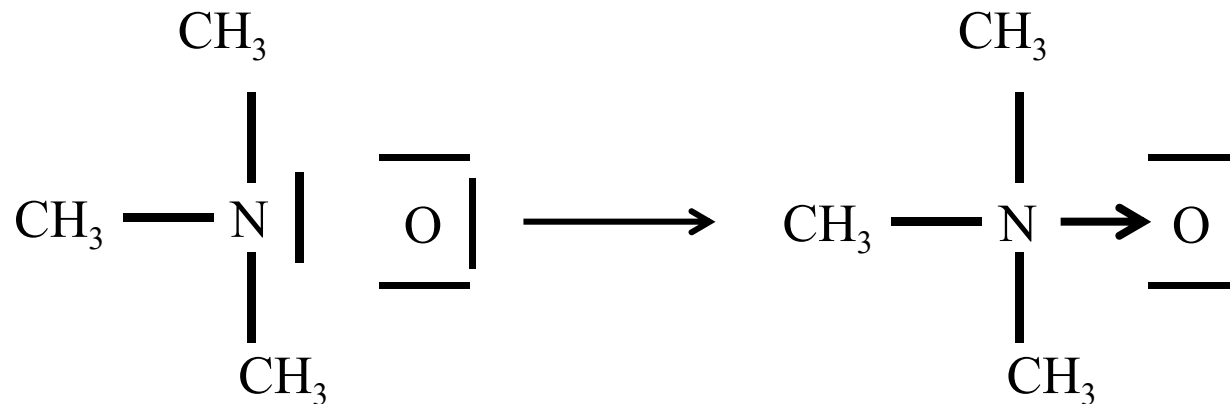
**Exemple:**





## *Les liaisons datives*

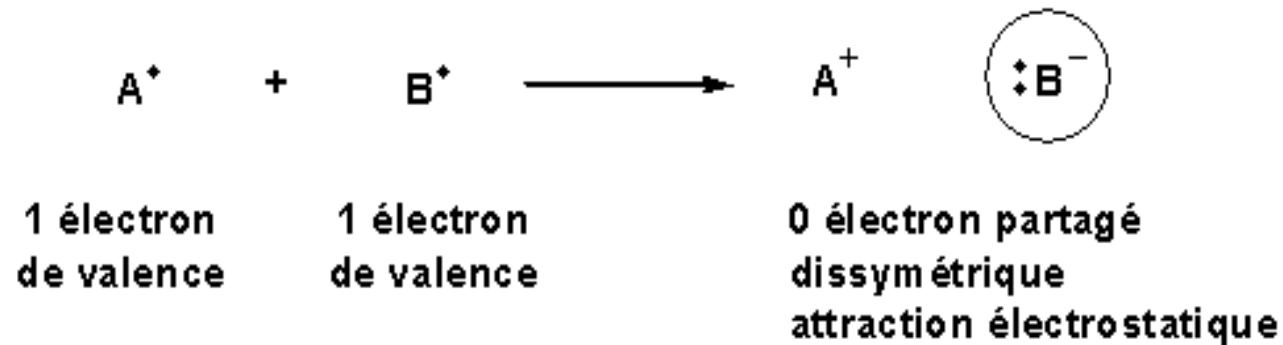
Des composés présentent une liaison dative impliquant un oxygène, en passant par la formation d'un état de valence



CO aussi présente une liaison dative :  $\text{C}=\text{O}$  la formule «normale» ne satisfait pas l'octet. Dès lors, on préférera  $\text{C}\equiv\text{O}$

## *Liaison ionique*

La liaison ionique résulte de l'attraction entre une espèce positive (cation) et une espèce négative (anion). La stabilité de la liaison est assurée par l'interaction électrostatique. Exemple (NaCl, K<sub>2</sub>S)



## *Liaison métallique*

Une liaison métallique n'existe que dans un solide métallique (**métaux**). Dans la liaison métallique, les électrons sont mobiles dans tout un réseau alors que dans une liaison ionique, les charges sont presque statiques. C'est cette mobilité des électrons qui donne aux métaux le caractère de très bons conducteurs électriques et thermiques.

# Les différences en électronégativité EN

Considérez deux atomes A et B:

- **1ère cas:**

un des deux atomes a une grande tendance de donner des électrons et l'autre a une grande tendance de les accepter,  $|EN_{AB}| \gg 0$

⇒ un ou plusieurs électrons changent propriétaire en formant des ions, **'liaison ionique'**

- **2ième cas:**

les deux atomes aiment accepter des électrons (les deux ont une électronégativité haute et comparable) ⇒ ils partagent deux électrons **'liaison covalente'**

$|EN_{AB}| \approx 0$  (**liaison covalente non polaire**);  $|EN_{AB}| > 0$  (**liaison covalente polaire**)

- **3ième case:**

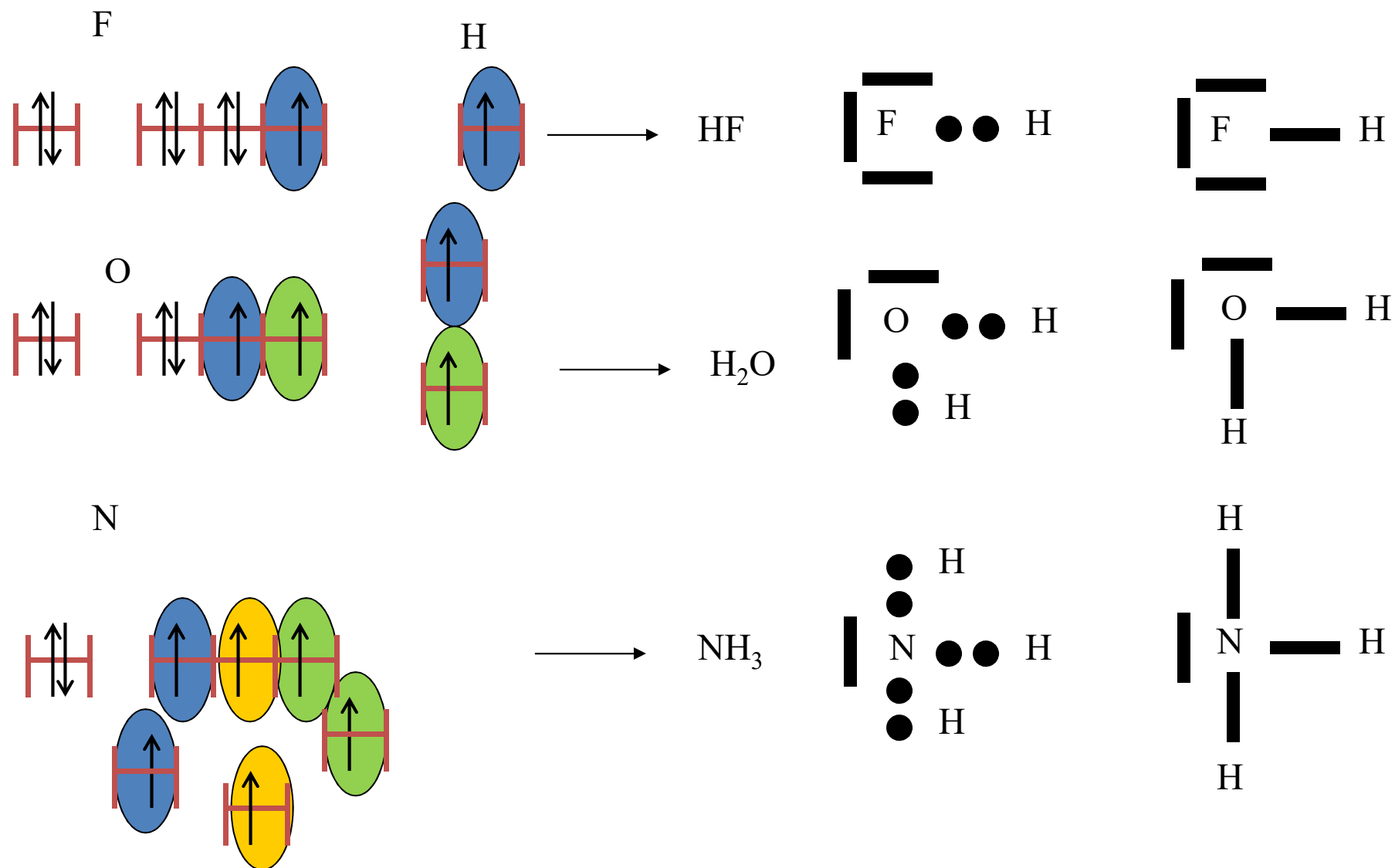
les deux atomes aiment donner des électrons (les deux ont une EN basse)

⇒ plusieurs atomes donne leurs électrons de valence en formant un pool d'électrons qui sont partagés par tous les atomes

$|EN_{AB}| \approx 0$  (et EN petite) **'liaison métallique'**

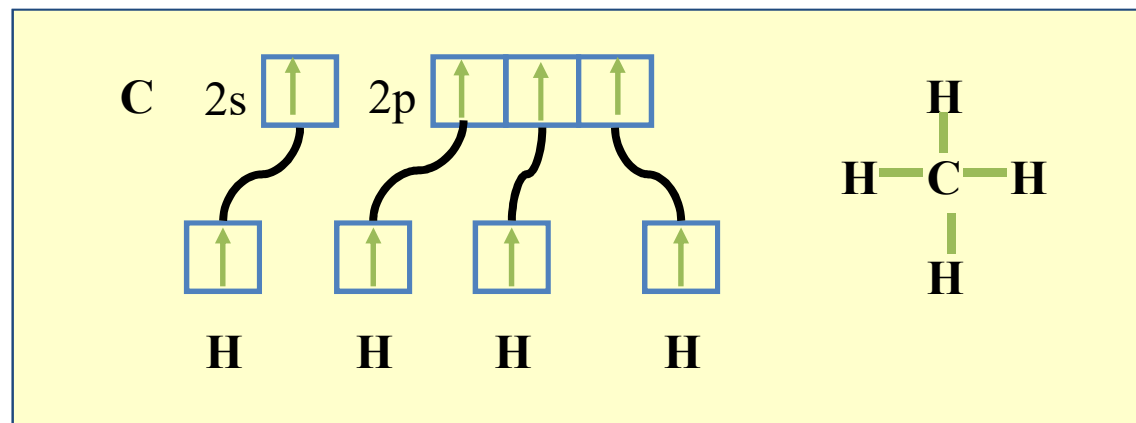
***Exemple de liaison***

## *La liaison chimique*



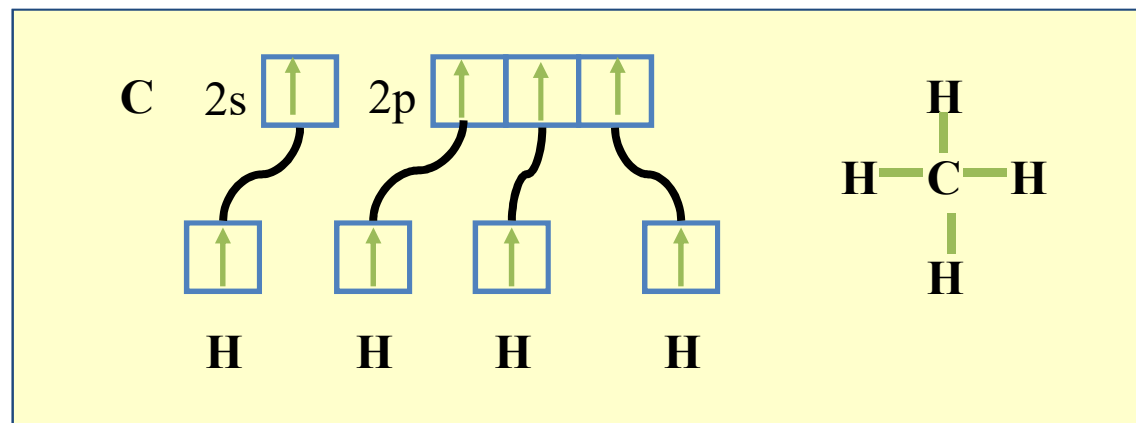
# Méthane CH<sub>4</sub>

Molécule tétraédrique



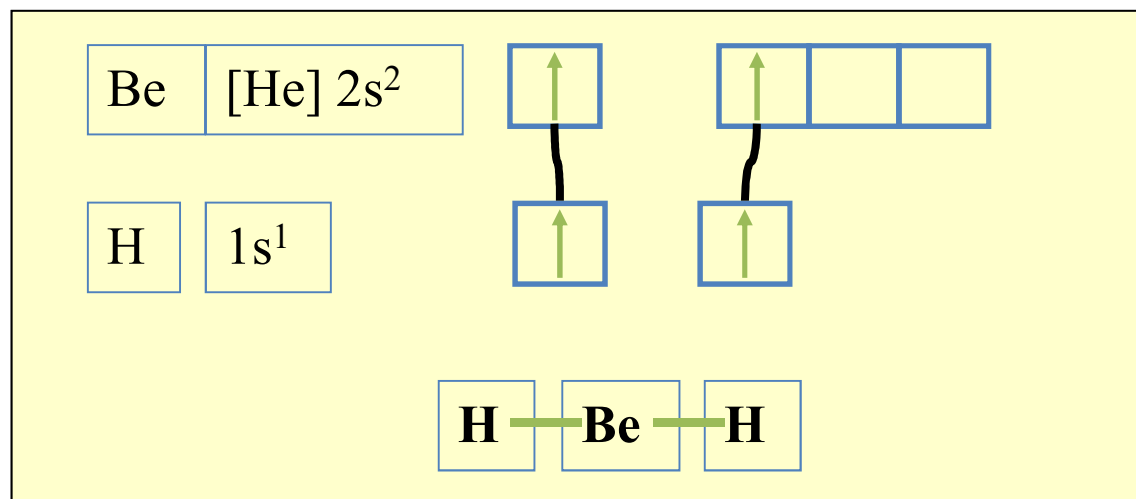
## Méthane $\text{CH}_4$

Molécule tétraédrique



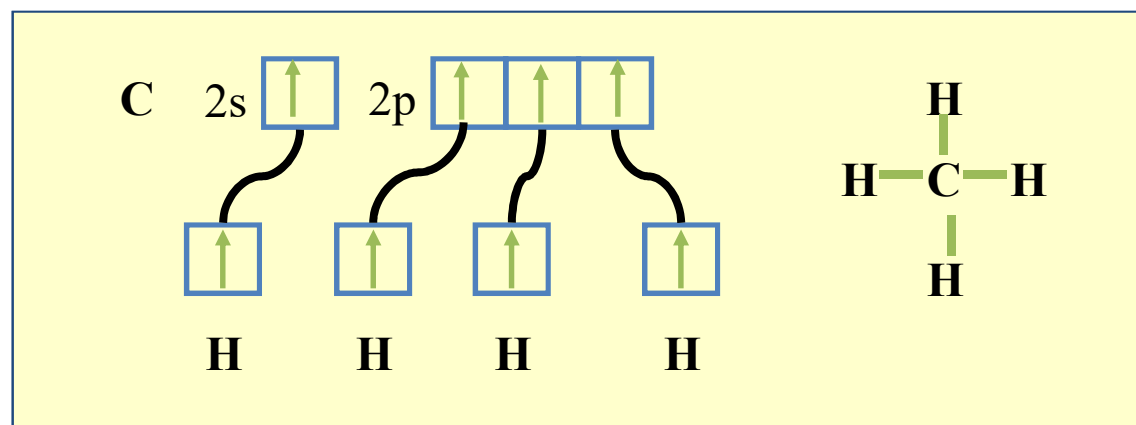
## $\text{BeH}_2$

Molécule linéaire



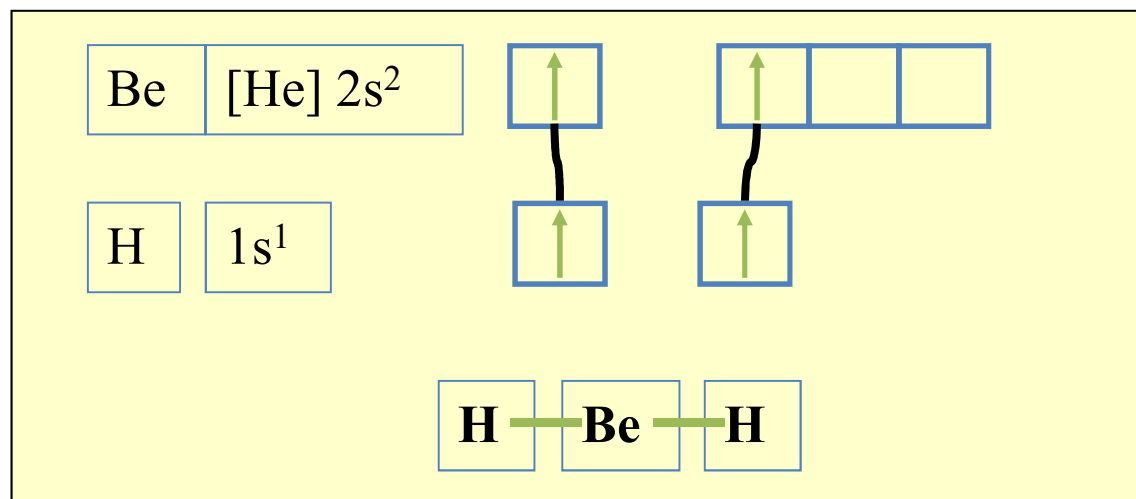
## Méthane $\text{CH}_4$

Molécule tétraédrique



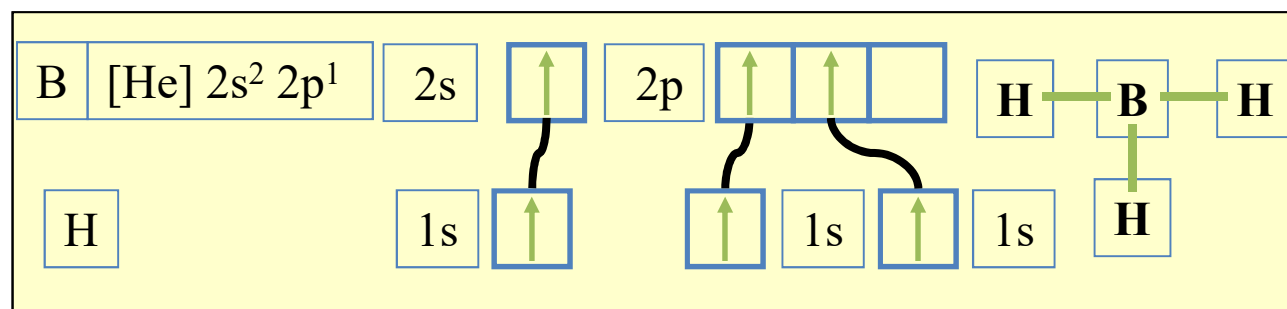
## $\text{BeH}_2$

Molécule linéaire



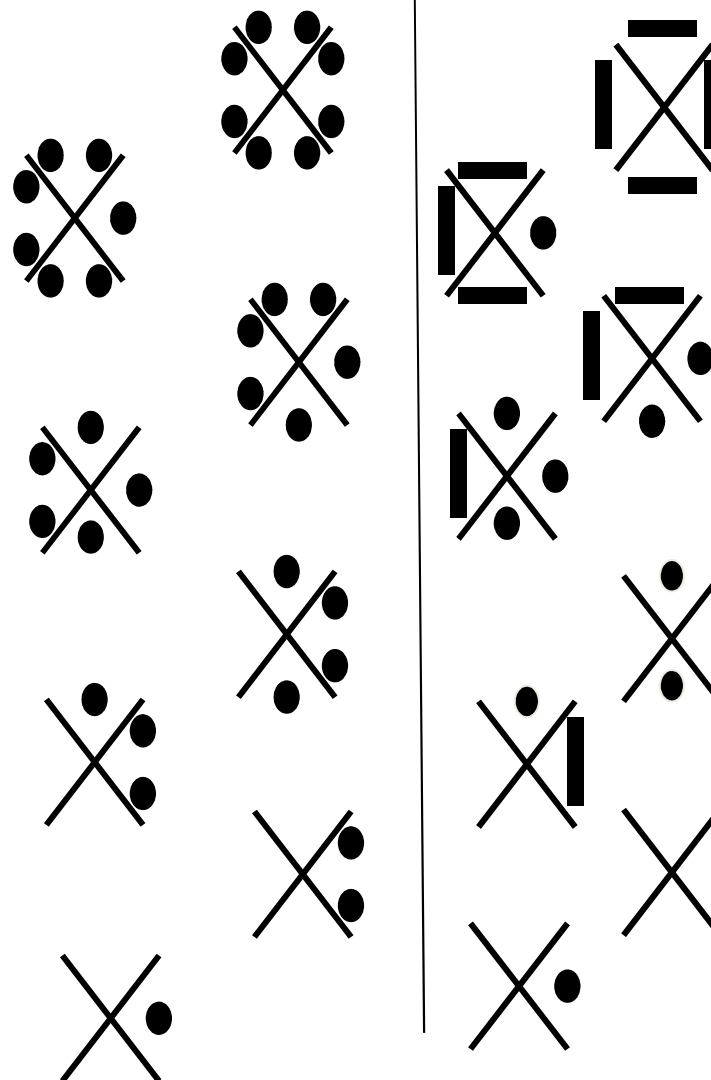
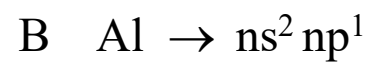
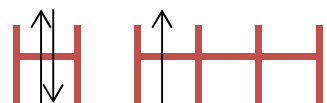
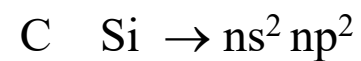
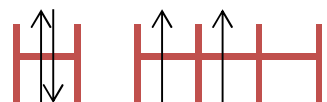
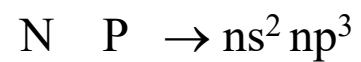
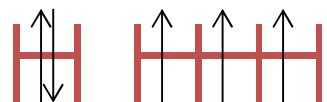
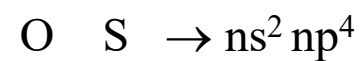
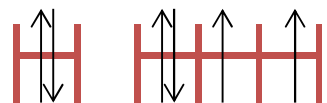
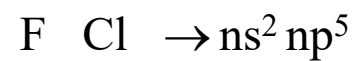
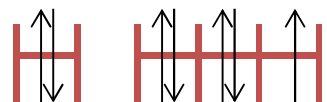
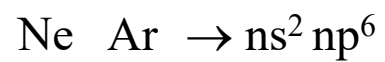
## $\text{BH}_3$

Molécule plane



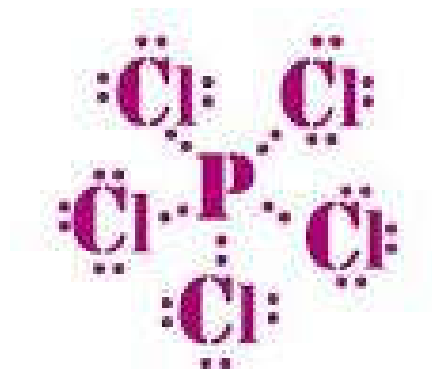


## *La structure de LEWIS des atomes*



## Les limites du modèle de LEWIS

Comment expliquer l'existence de  $\text{PCl}_5$ , composé « hypervalent » au sens de l'octet qui ne peut justifier que l'existence de  $\text{PCl}_3$



Chaque fois que les orbitales d de l'atome central intervient dans la formation de la liaison, la saturation en électrons est supérieure à 8.

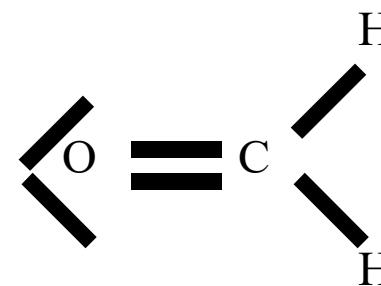
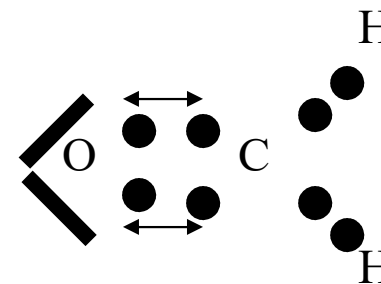
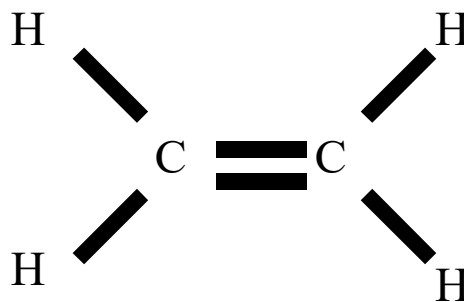
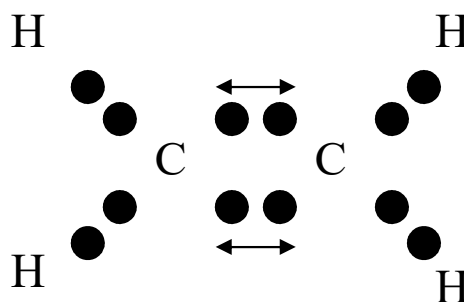
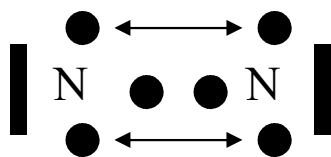
### Solutions proposées:

La promotion vers un état de valence du P (S,...)

## *Les liaisons multiples*

On parle de liaison multiple lorsque plusieurs paires électroniques sont partagées par deux atomes.

Quelques exemples classiques:  $\text{N}\equiv\text{N}$ ;  $\text{H}_2\text{C}=\text{O}$ ;  $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$



# ***Méthode R.P.E.C.V***

*Répulsion des Paires Electroniques de la Couche de Valence*

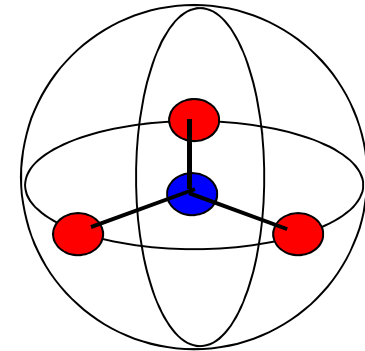
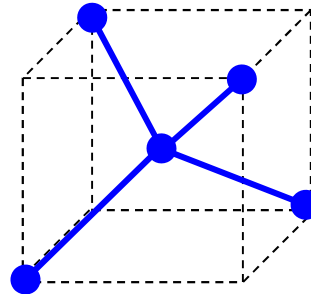
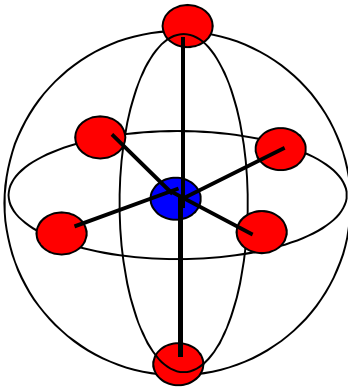
# Représentation "tridimensionnelle" de Cram

## La Géométrie des Molécules

### Méthode V.S.E.P.R

Ou Méthode de GILLESPIE

Valence Schell Electronic Pair Répulsion



### Ou Méthode R.P.E.C.V

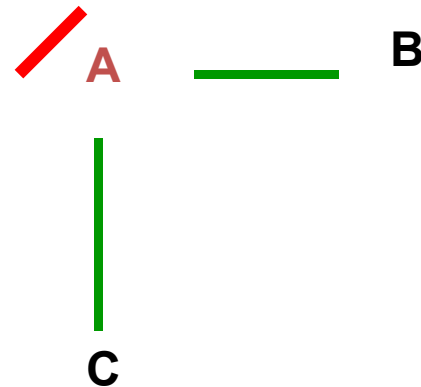
Répulsion des Paires Electroniques de la Couche de Valence

## Principe de la méthode

Dans une molécule, l'**atome central** est entouré par des doublets d'électrons

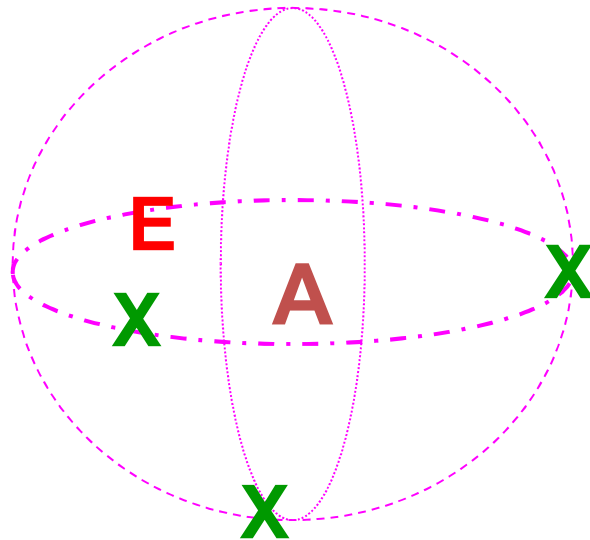
Doublets de liaisons : X

Doublets libres : E



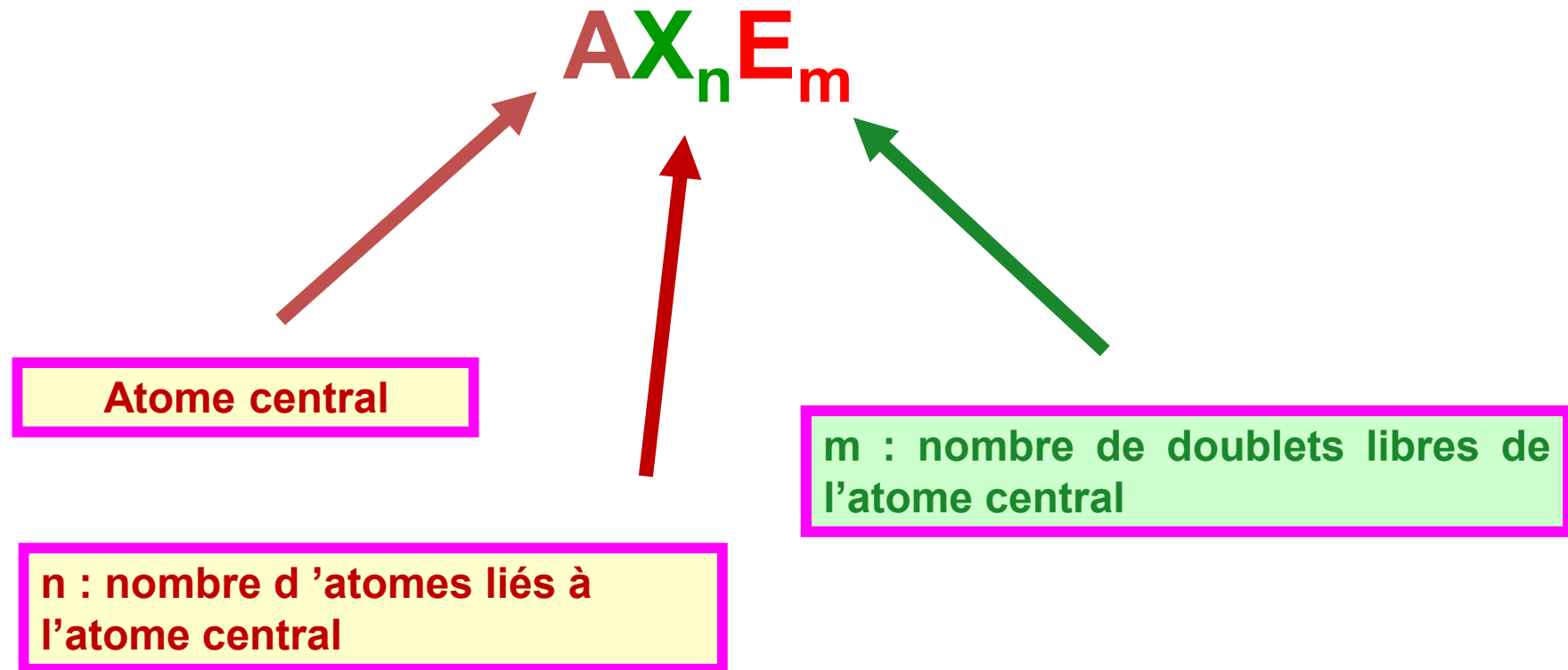
## Ces doublets électriquement chargés se repoussent

Ils vont se placer le plus loin possible les uns des autres sur une sphère centrée sur l'atome central A



On obtient une figure de répulsion différente selon le nombre de doublets

# Détermination du type moléculaire







Type moléculaire



Figure de répulsion

Tous les doublets participent à la figure de répulsion  
( sauf liaisons multiples)

$$p = n + m$$

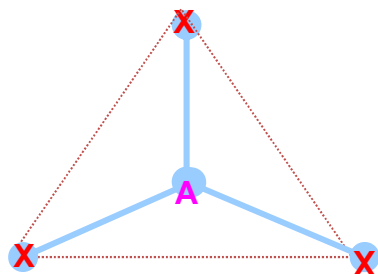
- $p = 2$  Droite
- $p = 3$  Triangle équilatéral
- $p = 4$  Tétraèdre
- $p = 5$  Bi-pyramide à base triangulaire
- $p = 6$  Octaèdre

**p = 3**

Triangle équilatéral

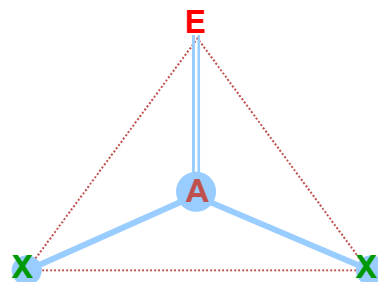
Tous les sommets sont équivalents

$AX_3$



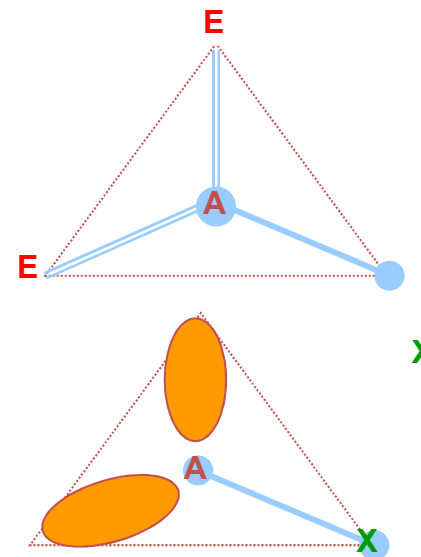
Triangle équilatéral

$AX_2E$



Forme de V ( $120^\circ$ )

$AXE_2$

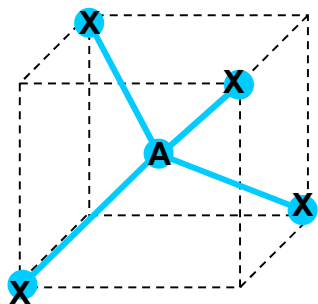


Linéaire

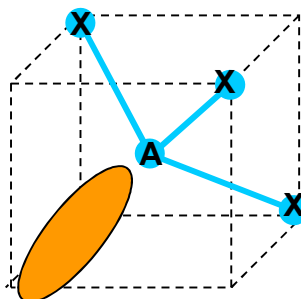
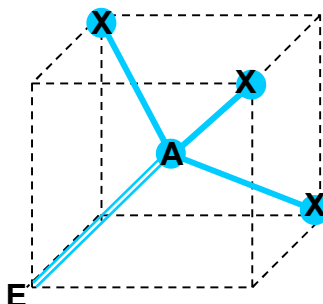
$$p = 4$$

## Tétraèdre

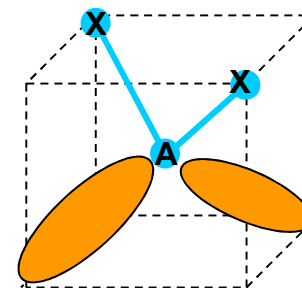
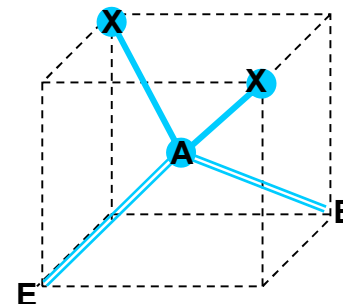
Tous les sommets sont équivalents



Tétraèdre



Pyramide base triangle



Forme de V ( 109,5°)

**p = 5**

## Bi-pyramide à base triangle

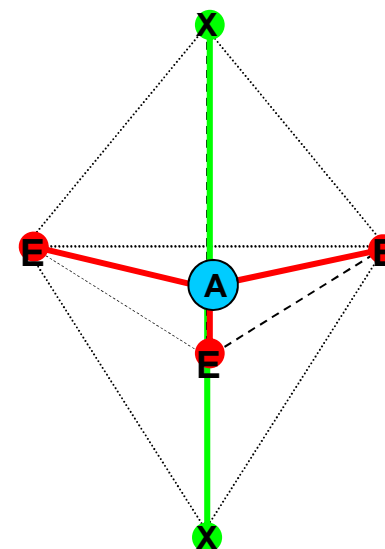
**2 types de sommets**

**Axiaux**

**Equatoriaux**

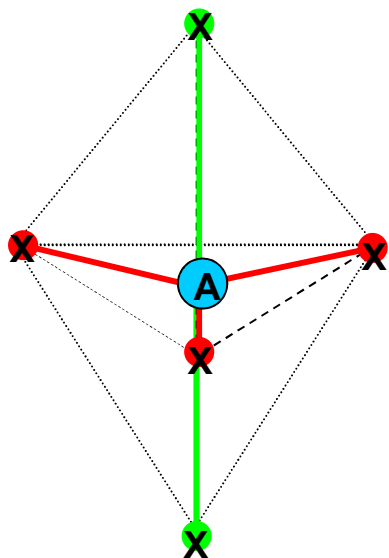
**Les positions ne sont plus équivalentes**

**Les doublets libres E se placeront toujours prioritairement en position Equatoriale**

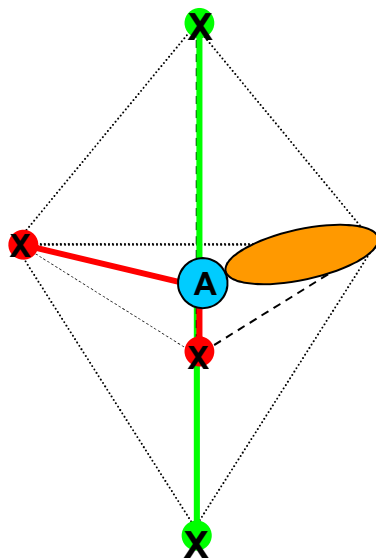
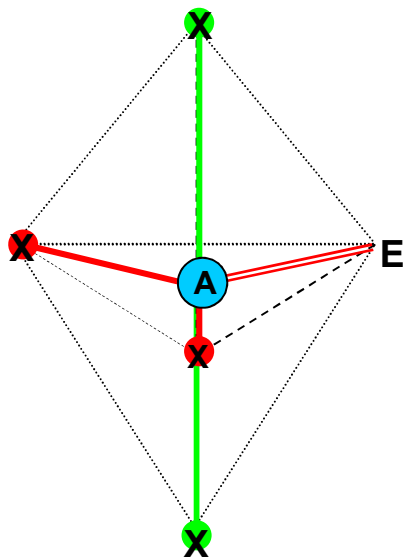


**Un doublet libre est plus « encombrant » qu'un doublet de liaison.**

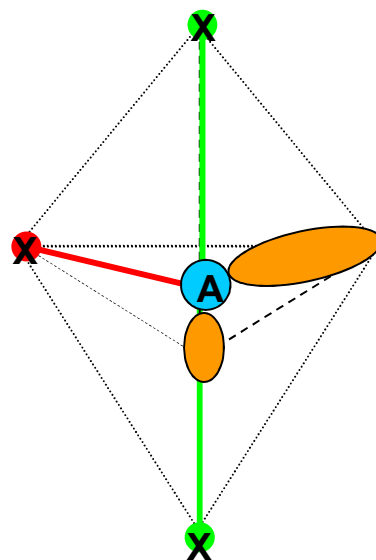
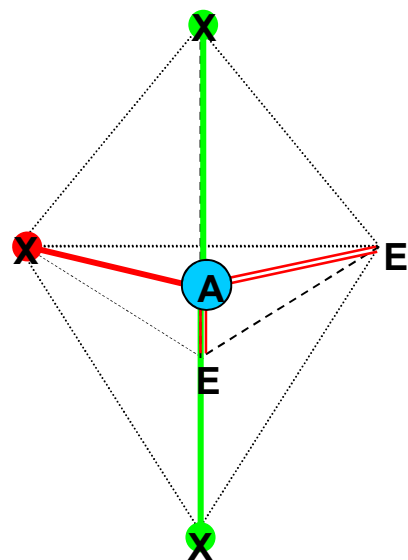
**En équatorial il y a des angles de 120° et donc plus de place qu'en axial (90°)**



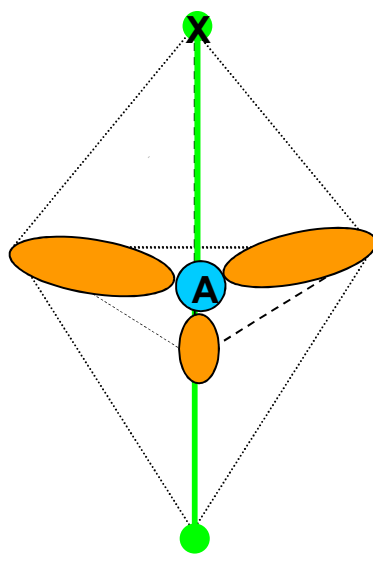
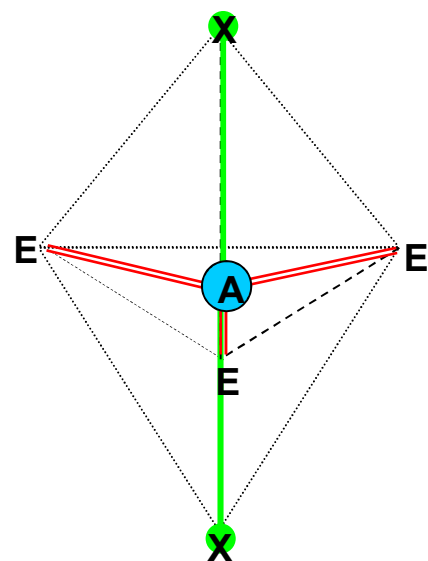
Bipyramide à base triangle



Pyramide déformée



Forme de T

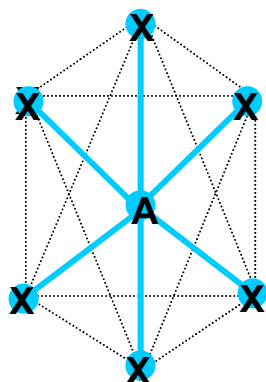


Linéaire

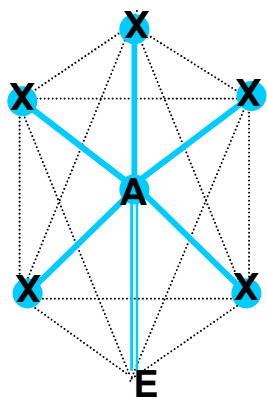
$p = 6$

## Octaèdre

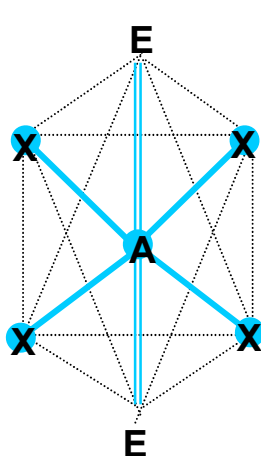
$AX_6$



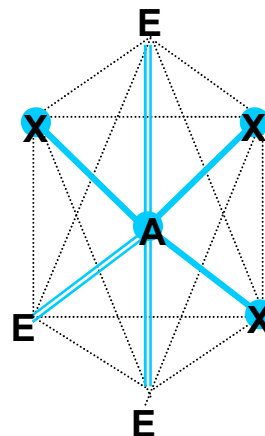
$AX_5E$



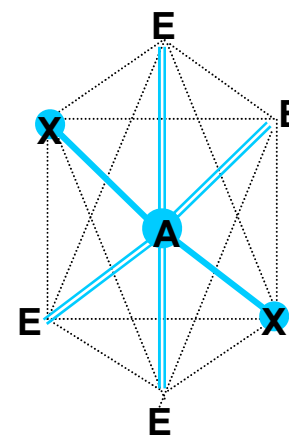
$AX_4E_2$



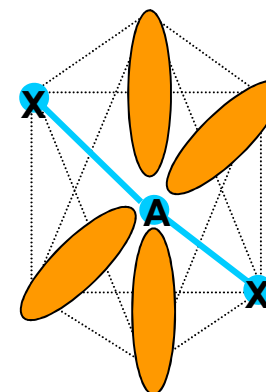
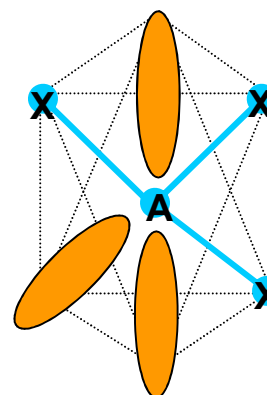
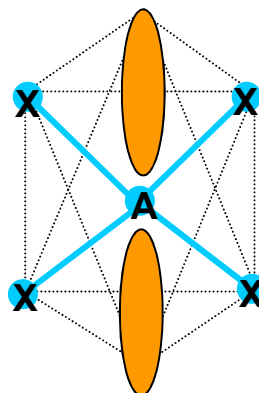
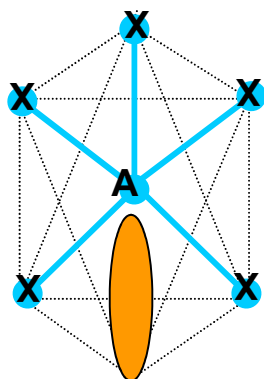
$AX_3E_3$



$AX_2E_4$



## Octaèdre



Pyramide à base carrée

Carré

Forme de T

Linéaire

Les 2ème et 4ème doublets se mettent obligatoirement à l'opposé des 1° et 3ème

# *Orbitales moléculaires (OM)*



## *La liaison dans le modèle ondulatoire*

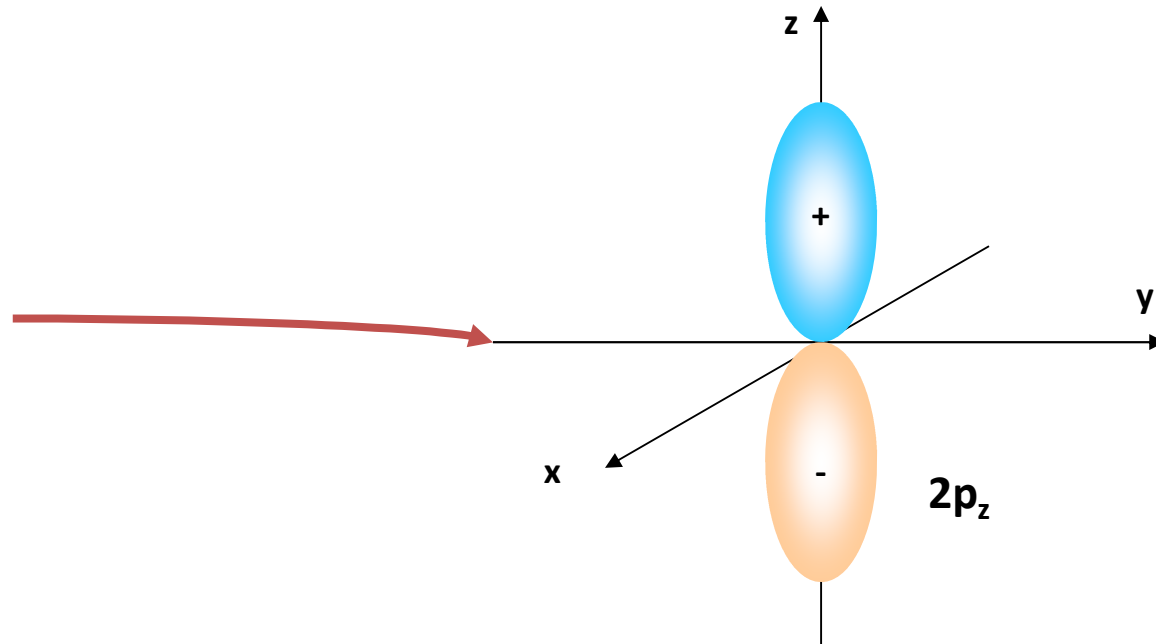
### Rappel orbitales atomiques

➤ L'orbitale atomique est caractérisé par une combinaison des trois nombres quantiques  $n$ ,  $l$  et  $m$ .

$n = 1, l = 0, m = 0$



$n = 2, l = 1, m = 0$



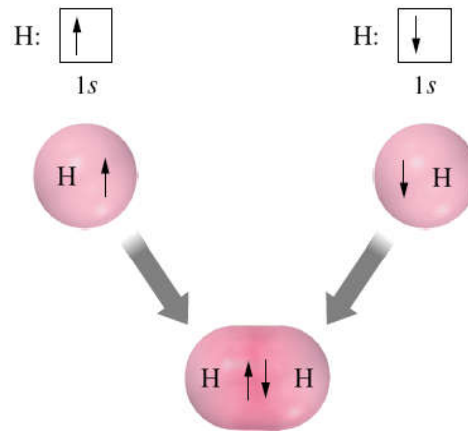
## *La liaison dans le modèle ondulatoire*

### Rappel orbitales atomiques

- L'orbitale atomique est caractérisé par une combinaison des trois nombres quantiques  $n$ ,  $l$  et  $m$ .
- Le comportement de l'électron est entièrement décrit par une fonction , **fonction d'onde** ou **orbitale atomique** .
- L'orbitale permet de déterminer la probabilité de présence de l'électron dans toute zone de l'espace.
- Elle est usuellement représentée par une surface qui délimite le volume à l'intérieur duquel existe une très forte probabilité de présence de l'électron .
- Une orbitale atomique est occupée par un maximum de deux électrons de spins opposés.

*Recherche des orbitales moléculaires . C.L.O.A. ( combinaison linéaire des orbitales atomiques ) : L.C.A.O. ( linear combination of atomic orbitals )*

- Quand deux atomes se lient, les O.A. de valence de ces atomes se recouvrent, fusionnent pour donner des O.M.
- Orbitale moléculaire (OM): combinaison de deux orbitales atomiques (OA) appartenant à des atomes distincts.
- Ex: formation de  $H_2$



- L'énergie de l'OM  $s_{1s}$  est plus basse que celle des OA  $1s$ ;

# Caractéristiques des orbitales moléculaires (OM)

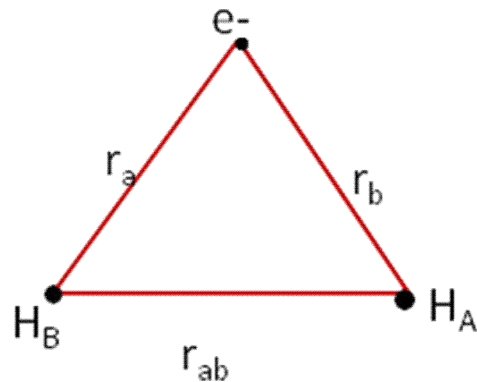
- Les OM sont des régions d'une molécule où la probabilité de trouver des électrons est élevée.
- On obtient les OM en combinant de façon appropriée les orbitales des atomes liés dans la molécule (combinaison linéaire des orbitales atomiques, méthode LCAO).
- Une combinaison de deux orbitales s donne une orbitale liante  $\sigma$  et une orbitale antiliante  $\sigma^*$
- L'orbitale liante correspond à un niveau d'énergie plus bas que les OA des atomes séparés.
- L'orbitale antiliante correspond à un niveau d'énergie supérieur à celui des OA des atomes séparés.

## Etude des molécules diatomiques homonucléaires

### ► L'ion $\text{H}_2^+$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{2}{r_A} + \frac{2}{r_B} - \frac{1}{r_{AB}}\right) \quad H\phi = E\phi$$

est la fonction d'onde moléculaire ou OM.



L'électron se trouvant dans le champ des deux noyaux  $\text{H}_A$  et  $\text{H}_B$  sera décrit par une fonction d'onde appelée OM.

est une combinaison linéaire des fonctions d'onde  $\Psi_A$  (OA  $1s_A$ ) et  $\Psi_B$  (OA  $1s_B$ )

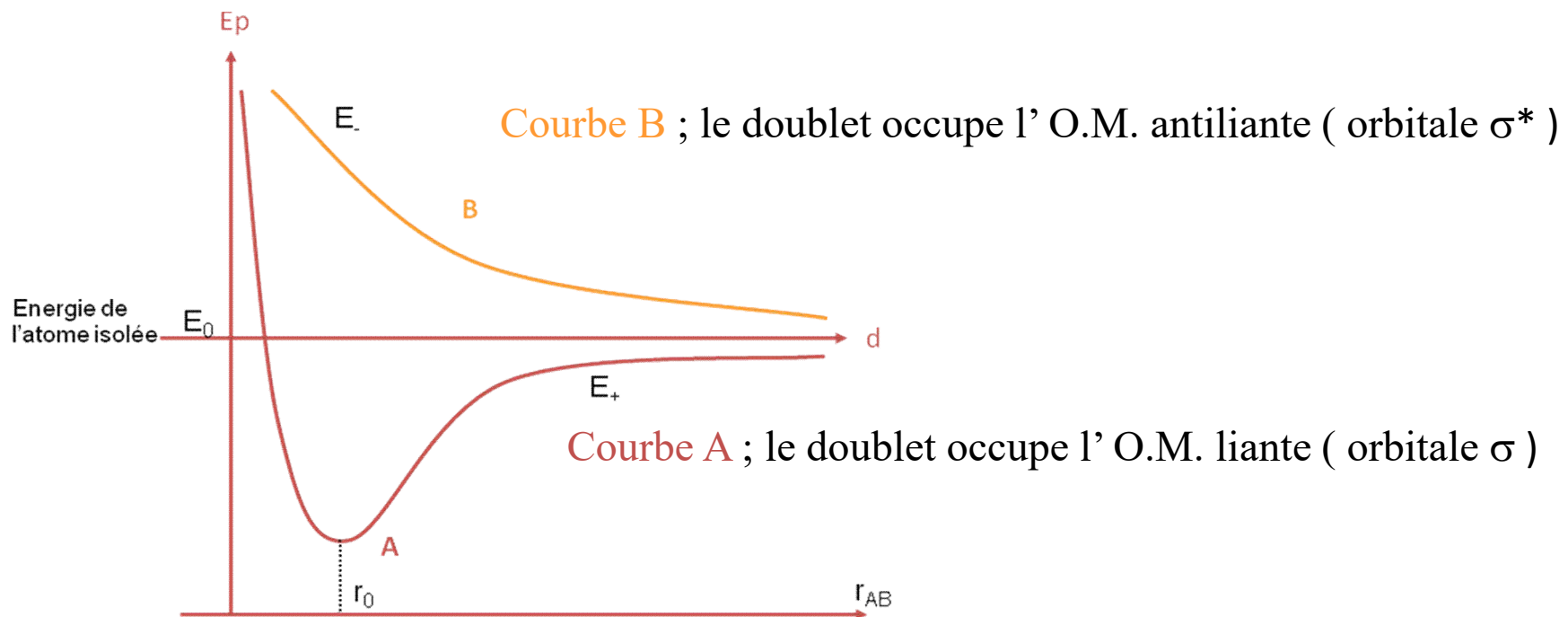
$$= C_1 \Psi_A + C_2 \Psi_B \quad \text{ou} \quad = C_1 (1s_A) + C_2 (1s_B)$$

Comme les deux noyaux de l'ion  $\text{H}_2^+$  sont identiques, on peut écrire :  $C_1^2 = C_2^2 \Rightarrow C_1 = \mp C_2$

Ainsi la combinaison linéaire  $\psi = C_1(1s_A) + C_2(1s_B)$  aura deux solutions :  $\psi_+ = C_1(1s_A + 1s_B)$  et  $\psi_- = C_1(1s_A - 1s_B)$

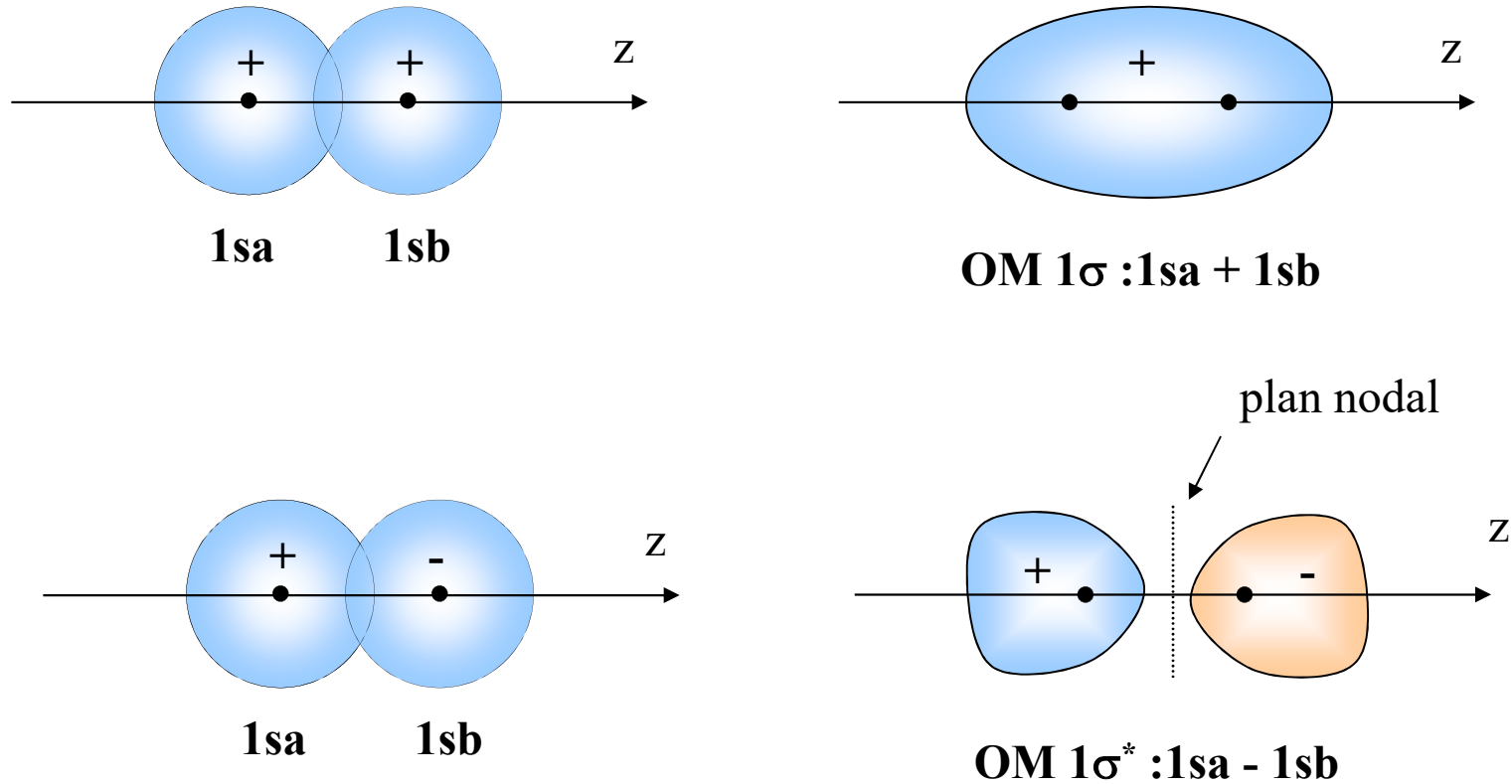
A partir des expressions de  $\psi_+$  et  $\psi_-$  et à l'aide de l'équation de Schrödinger, on peut calculer les énergies  $E_+$  et  $E_-$  :

$$\hat{H}\phi_+ = E_+\phi_+ \text{ et } \hat{H}\phi_- = E_-\phi_-$$

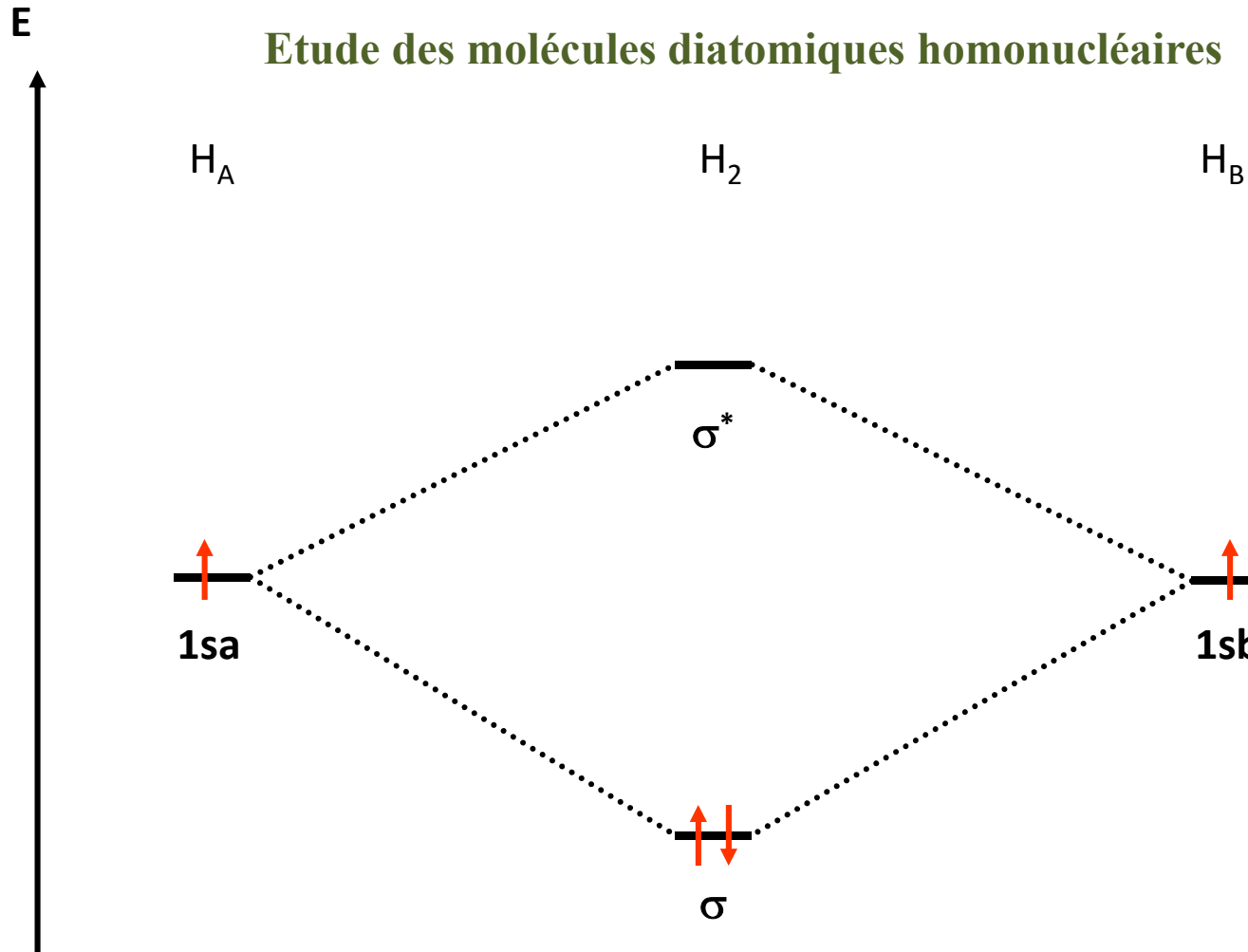


## Etude des OM liante et antiliante

La représentation spatiale de ces 2 OM est la suivante :



Le recouvrement des deux OA  $1s_A$  et  $1s_B$  se fait suivant l'axe joignant les deux noyaux  $H_A$  et  $H_B$  (on choisit également l'axe  $Oz$ ). Le recouvrement axial conduit à la formation de deux OM de type  $\sigma$ , ces OM  $\sigma$  étant construites à partir des OA  $1s$ , elles seront notées  $\sigma_{1s}$  pour l'OM liante et  $\sigma_{1s}^*$  pour l'OM antiliante.



**Remarque 1:** le nombre d 'O.M. que l 'on peut établir à partir d'un ensemble d'O.A. qui sert de base à la formulation des O.M. est égal au nombre d'O.A. qui constituent cette base .

**Remarque 2 :** l'O.M. liante correspond à la combinaison dans laquelle les deux O.A. s'ajoutent : il n'y a de recouvrement entre deux O.A. que si elles sont de même signe dans la région de recouvrement .

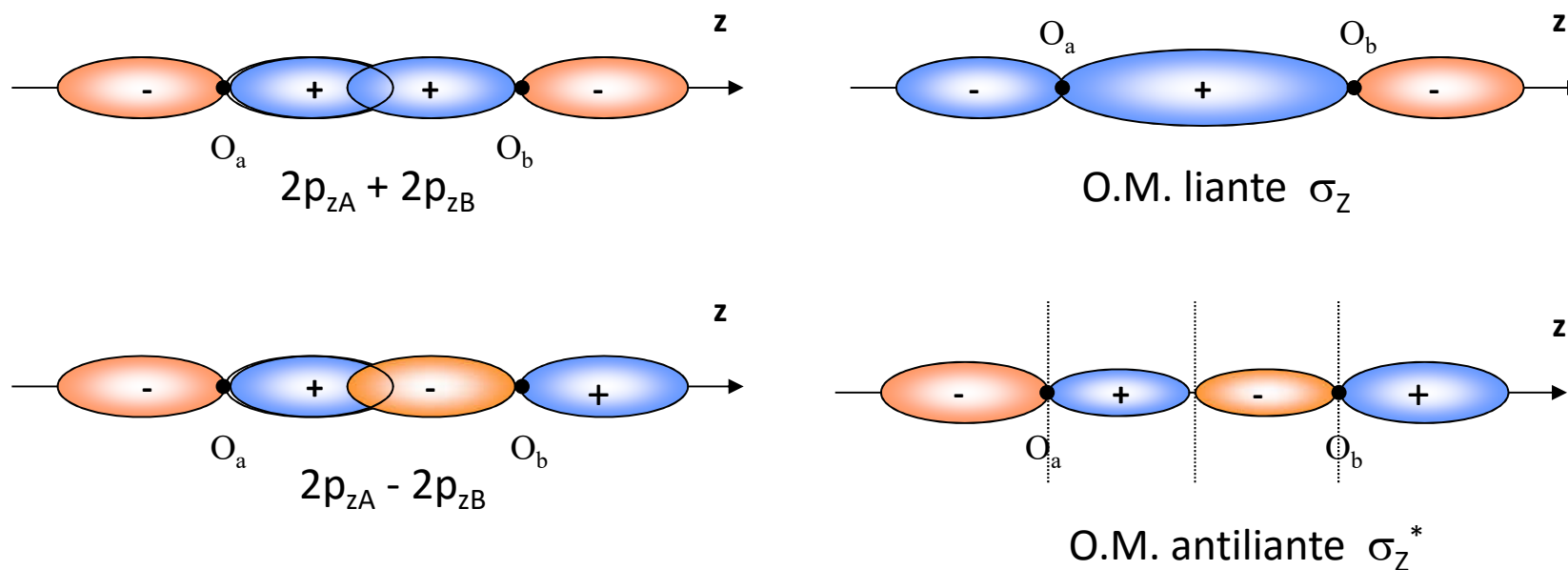


## Recouvrement conservant une symétrie axiale

Recouvrement  $2p_z-2p_z$

► Les 2 OA  $2p_z$  vont se recouvrir axialement pour donner 2 OM de type  $\sigma$  :  $\sigma 2p_z$  et  $\sigma^* 2p_z$  avec :

$$\sigma 2p_z = N (2p_{za} - 2p_{zb}) \quad \text{et} \quad \sigma^* 2p_z = N^* (2p_{za} + 2p_{zb})$$



Recouvrement axial  
Possibilité de libre rotation autour de l'axe internucléaire

## Recouvrement conservant une symétrie de réflexion par rapport à un plan

L'axe Oz étant l'axe de la molécule, les 2 OA  $2p_{x_a}$  et  $2p_{x_b}$ , aussi bien que les orbitales  $2p_{y_a}$  et  $2p_{y_b}$ , ne peuvent pas se recouvrir axialement, il y aura donc un recouvrement latéral conduisant aux OM de type  $\pi$ . Les OA  $2p_{x_a}$  et  $2p_{x_b}$  donneront des OM  $\pi_{2px}$  (liante) et  $\pi_{2px}^*$  (antiliante). Pour les deux OA  $2p_{y_a}$  et  $2p_{y_b}$  donneront des OM  $\pi_{2py}$  (liante) et  $\pi_{2py}^*$  (antiliante).

$$\begin{aligned}\pi_{2px} &= N (2p_{x_a} + 2p_{x_b}), & \pi_{2px}^* &= N^* (2p_{x_a} - 2p_{x_b}), \\ \pi_{2py} &= N (2p_{y_a} + 2p_{y_b}), & \pi_{2py}^* &= N^* (2p_{y_a} - 2p_{y_b})\end{aligned}$$

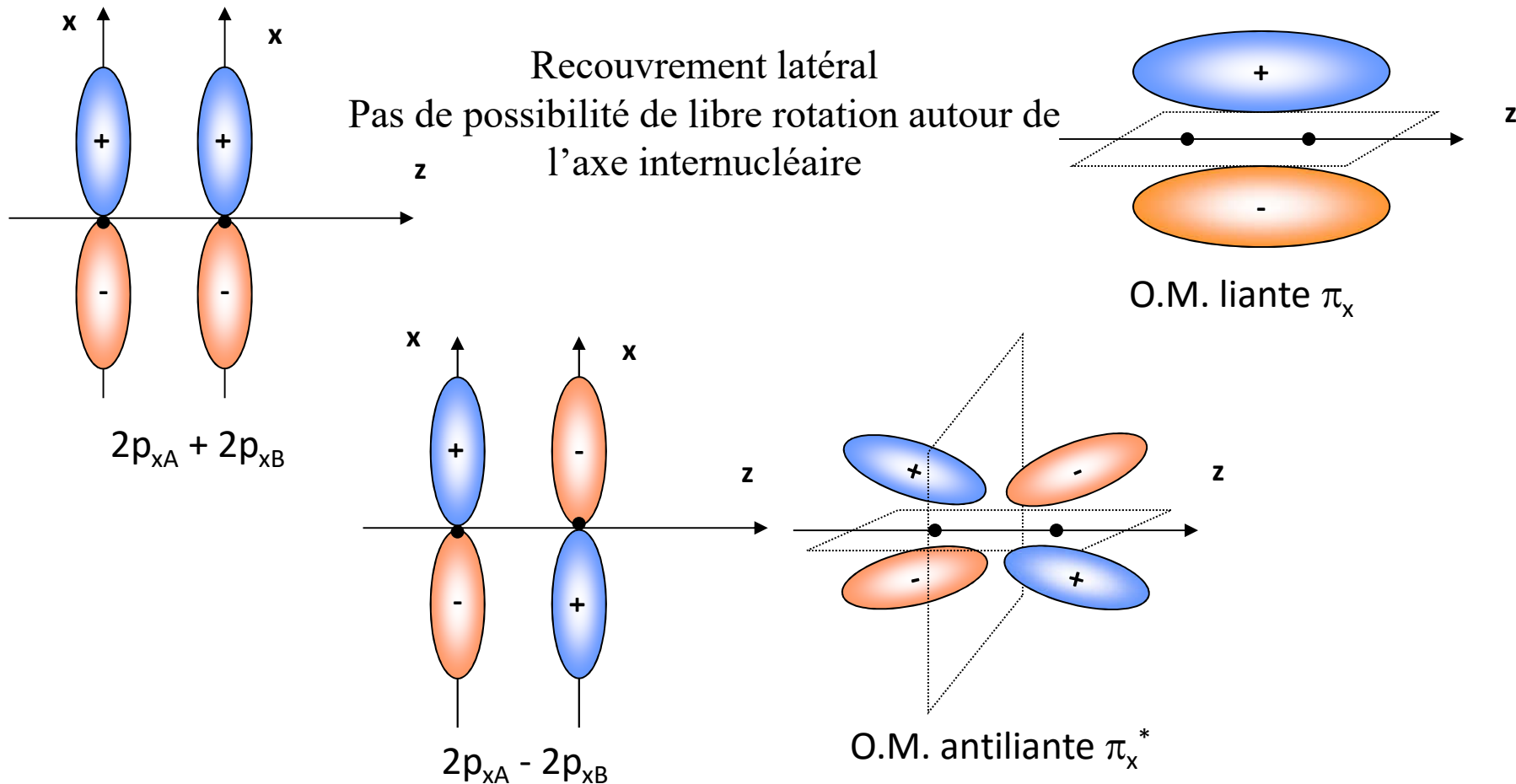
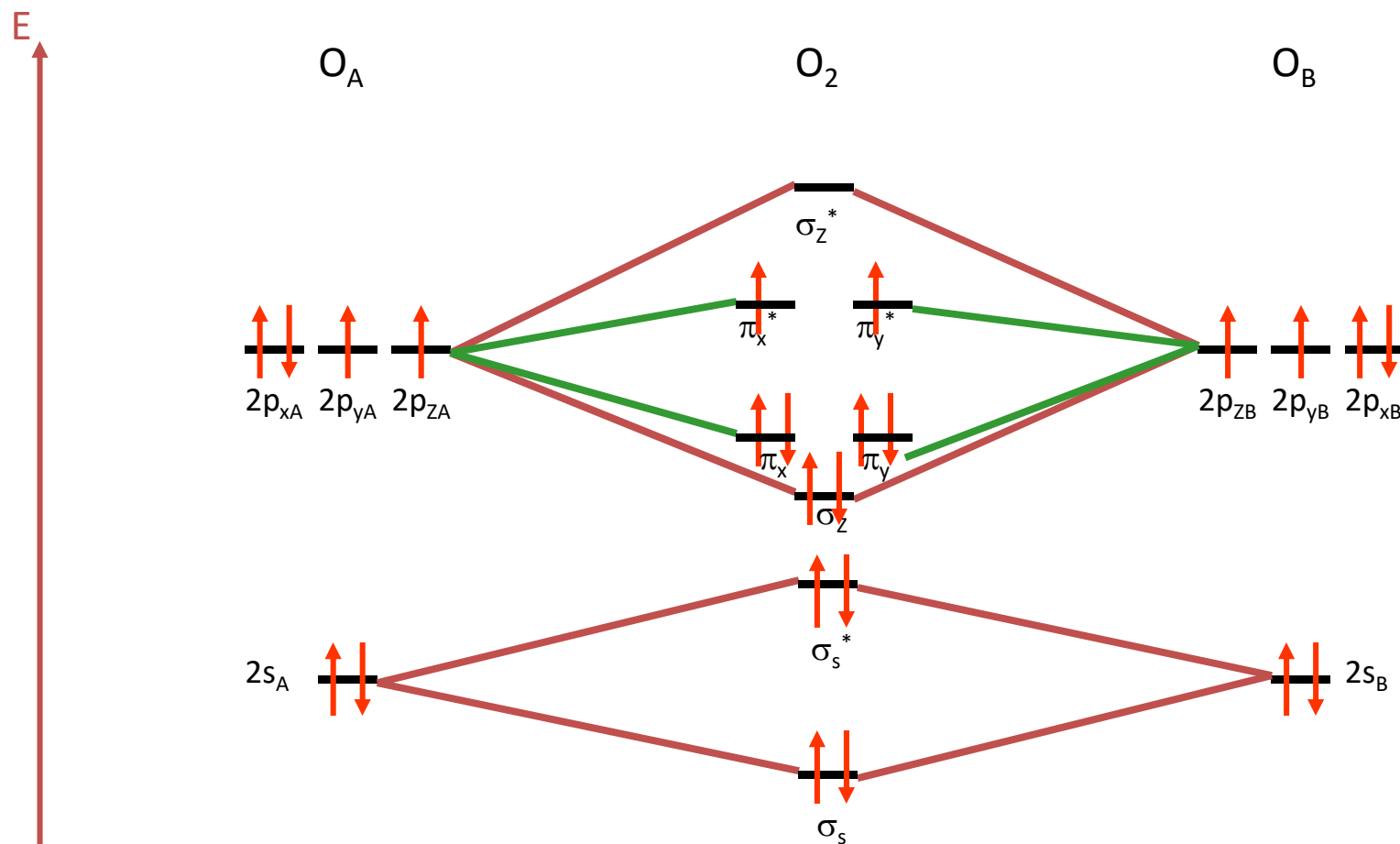


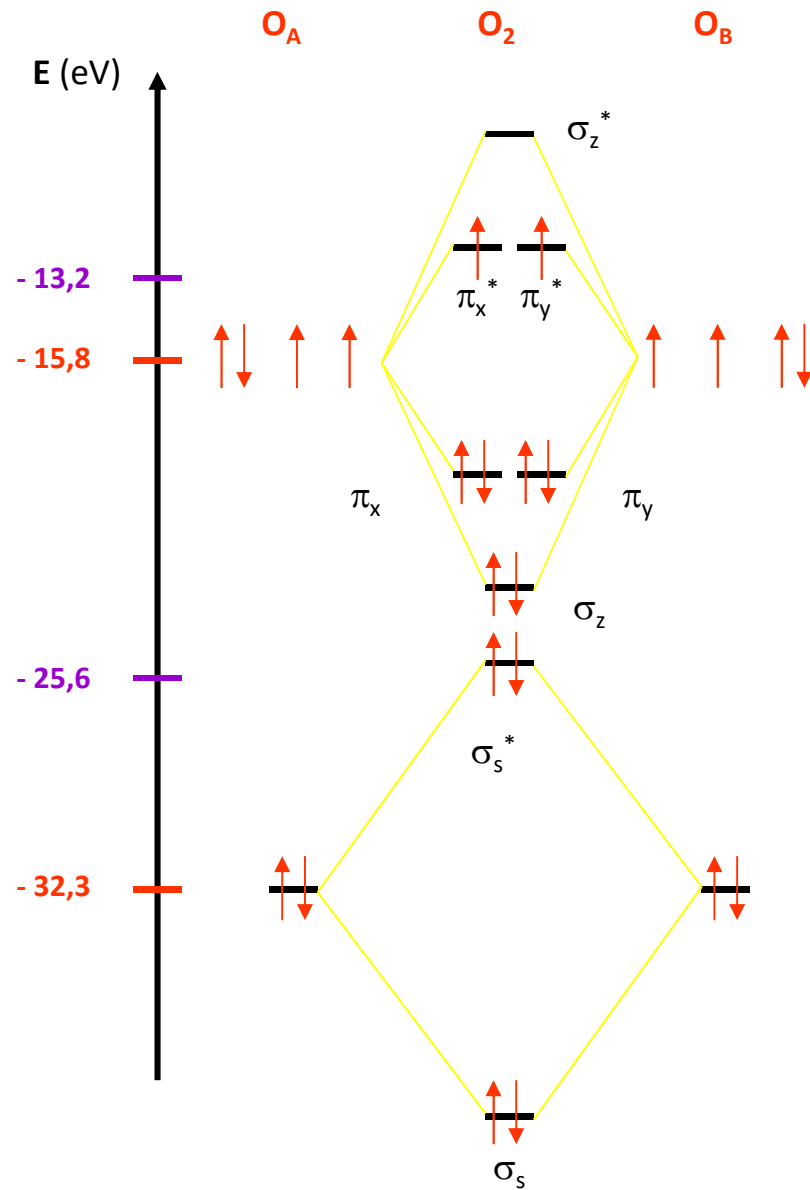
Diagramme des énergies relatives des orbitales de molécules diatomiques homonucléaires ; cas de  $O_2$



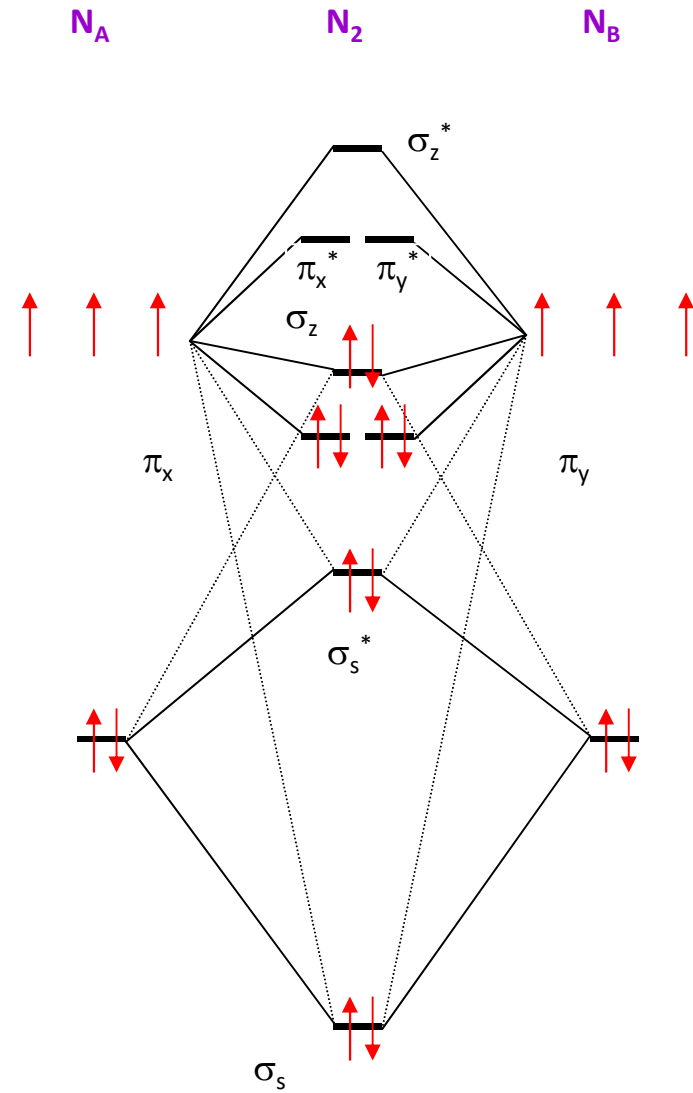
La configuration électronique de  $O_2$  est la suivante :  $(\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_z)^2 (\pi_x \pi_y)^4 (\pi_x^* \pi_y^*)^2$

$$\text{ordre de liaison} = \frac{\text{nbre } \sigma \text{ liants} - \text{nbre } \sigma^* \text{ antiliants}}{2} = \frac{8 - 4}{2} = 2$$

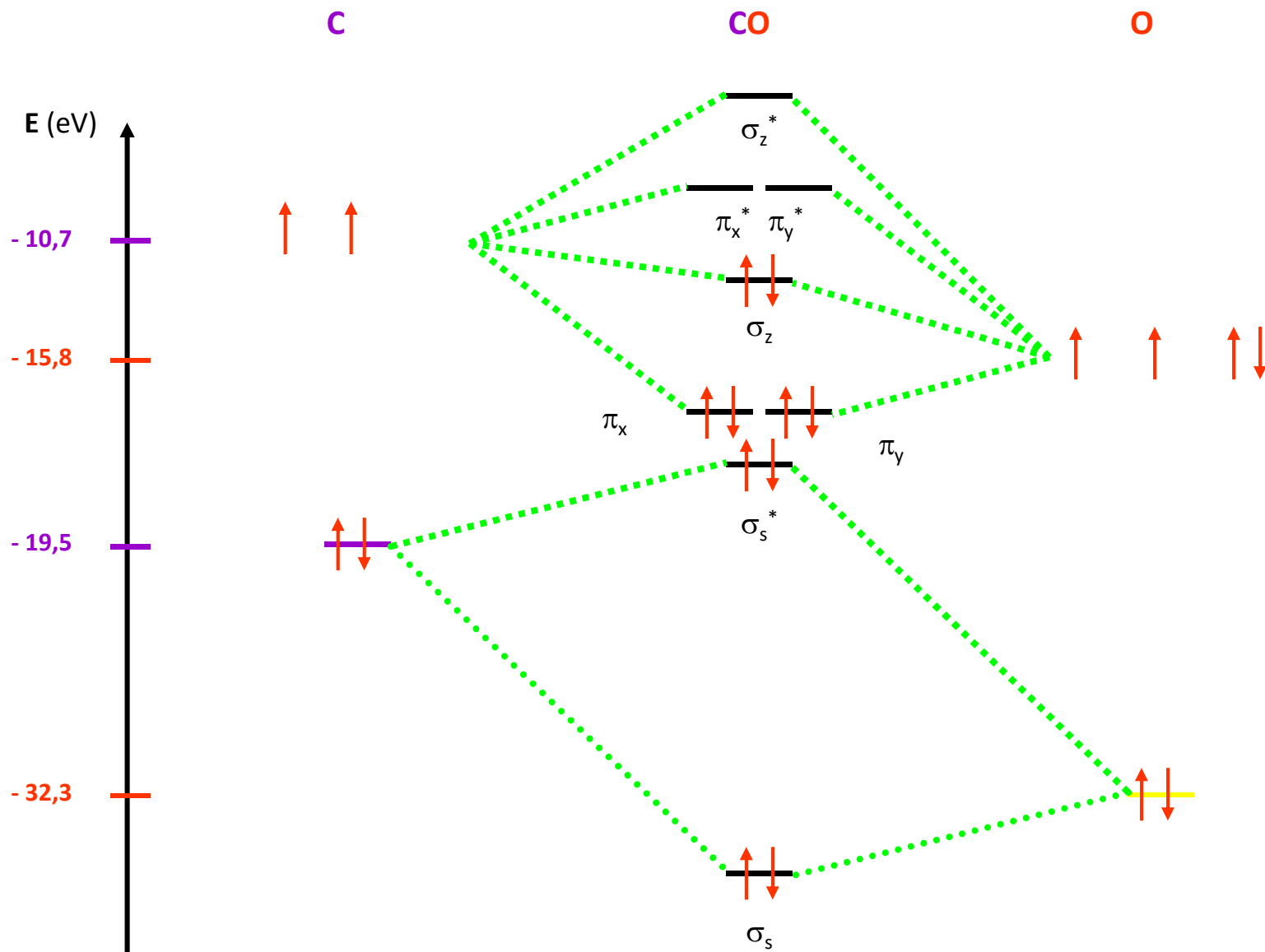
## Sans interaction s-p (O, Fe et Ne)



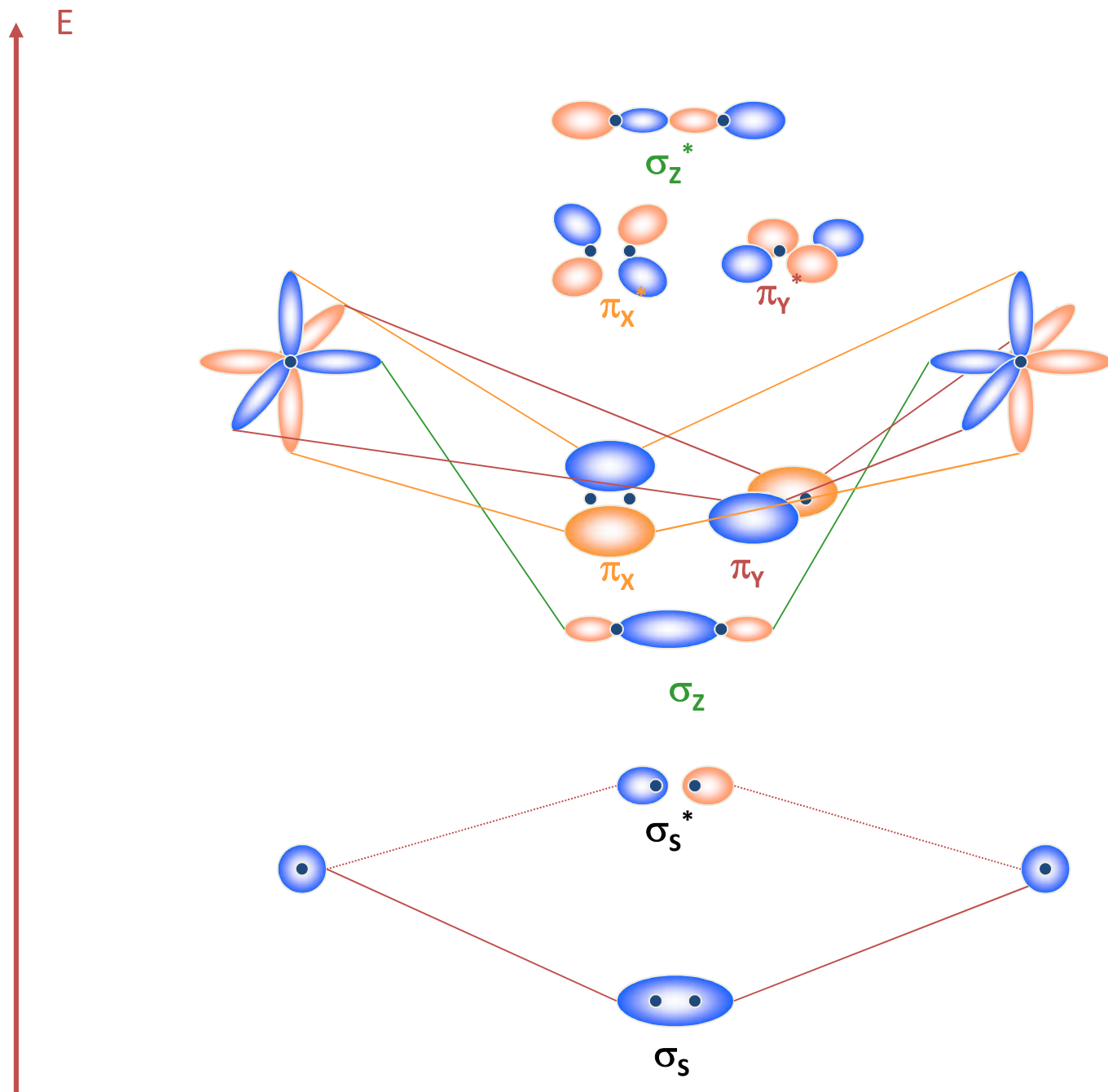
## Avec interaction s-p (Li, Be, B, C, N)

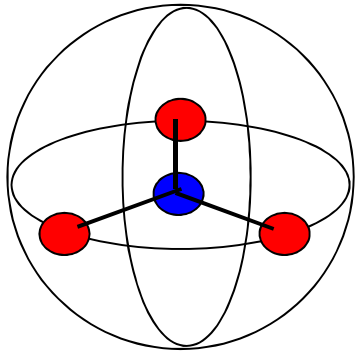


# Etude des molécules diatomiques hétéronucléaires ou dissymétriques









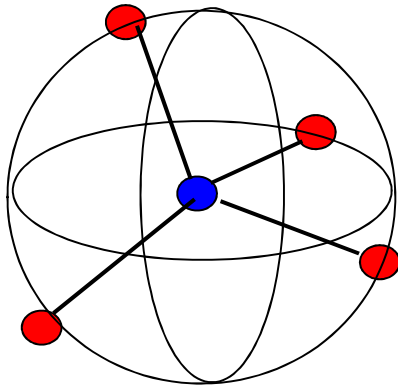
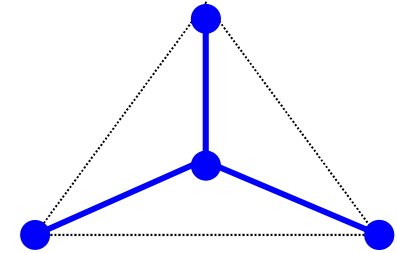
3 doublets

Figure de répulsion :  
Triangle équilatéral

Angles de  $120^\circ$

Figure plane

Tous les sommets sont équivalents



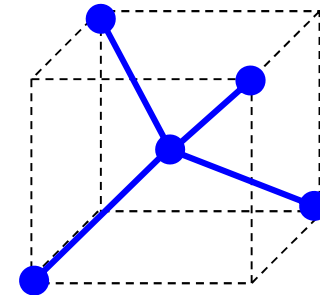
4 doublets

Figure de répulsion : Tétraèdre

Angles de  $109^\circ 27'$

Figure inscrite dans un cube

Tous les sommets sont équivalents





5 doublets

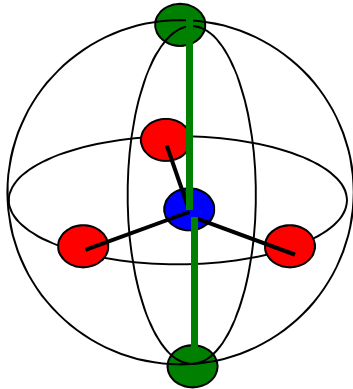


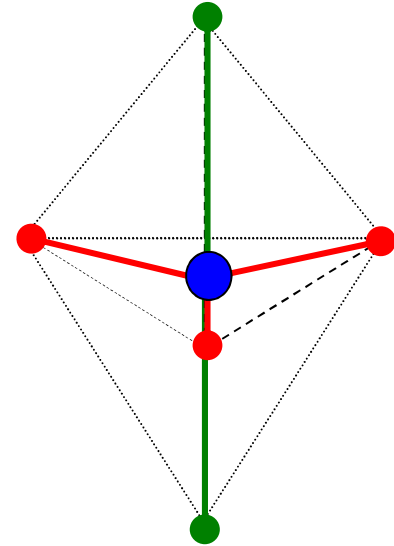
Figure de répulsion :  
bi-pyramide à base triangle

Angles de  $120^\circ$  et de  $90^\circ$

Les sommets ne sont pas équivalents :

Sommets de type axial

Sommets de type équatorial



6 doublets

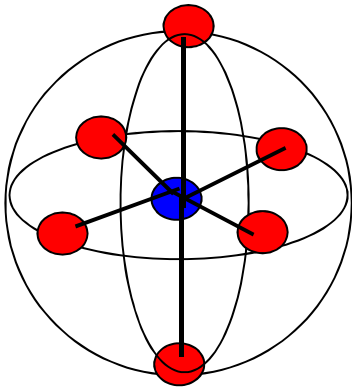
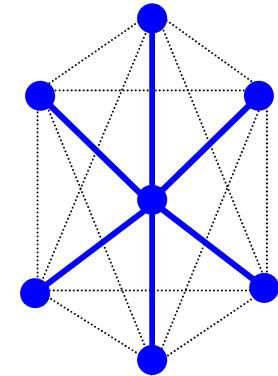


Figure de répulsion : Octaèdre

Angles de  $90^\circ$

Tous les sommets sont équivalents



## *La structure de LEWIS des atomes*

Composé	Nombre d'électrons externes	Modèle de Lewis
$\text{H}_2\text{O}$ Eau	O : 6 électrons externes H : 1 électron externe $(1)2 + 6 = 8$ électrons 2 doublets liants 2 doublets non liants	$\begin{array}{c} \text{H} - \text{O} - \text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$
$\text{NH}_3$ Ammoniac	N : 5 électrons externes H : 1 électron externe $5 + (1)3 = 8$ électrons 3 doublets liants 1 doublet non liant	$\begin{array}{c} \text{H} - \text{N} - \text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$
$\text{CH}_4$ Méthane	C : 4 électrons externes H : 1 électron externe $4 + (1)4 = 8$ électrons 4 doublets liants	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H} - \text{C} - \text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$

CO<sub>2</sub>, HCN, BF<sub>3</sub>, COCl<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, SiH<sub>4</sub>, AsH<sub>3</sub>, SCl<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>CN.

## Représentation "tridimensionnelle" de Cram

Le modèle de Cram permet de modéliser la géométrie spatiale de la molécule.

Composé	Electrons externes	Modèle de Lewis	Modèle de Cram
H <sub>2</sub> O Eau	O : 6 électrons externes H : 1 électron externe (1)2 + 6 = 8 électrons 2 doublets liants 2 doublets non liants	$\text{H} - \text{O} - \text{H}$	 Structure <b>coudée</b>
NH <sub>3</sub> Ammoniac	N : 5 électrons externes H : 1 électron externe 5 + (1)3 = 8 électrons 3 doublets liants 1 doublet non liant	$\text{H} - \text{N} - \text{H}$   H	 Structure <b>pyramidale</b> à base triangulaire
CH <sub>4</sub> Méthane	C : 4 électrons externes H : 1 électron externe 4 + (1)4 = 8 électrons 4 doublets liants	$\text{H}$   $\text{H} - \text{C} - \text{H}$   H	 Structure <b>tétraédrique</b> Carbone <b>tétravalent</b> Carbone <b>tétragonal</b> Angles de 109°
H <sub>2</sub> CO Méthanal	C : 4 électrons externes O : 6 électrons externes H : 1 électron externe (1)2 + 4 + 6 = 12 électrons 4 doublets liants 2 doublets non liants	$\text{H}$   $\text{C} = \text{O}$   H	 Structure <b>plane</b> Carbone <b>tétravalent</b> Carbone <b>trigonal</b> Angles de 120°
CO <sub>2</sub> Dioxyde de carbone	C : 4 électrons externes O : 6 électrons externes 4 + (6)2 = 16 électrons 4 d. liants 4 d. libres	$\text{O} = \text{C} = \text{O}$	 Structure <b>linéaire</b> Carbone <b>tétravalent</b> Carbone <b>digonal</b> Angles de 180°

## Les modes de recouvrement des orbitales 2p

